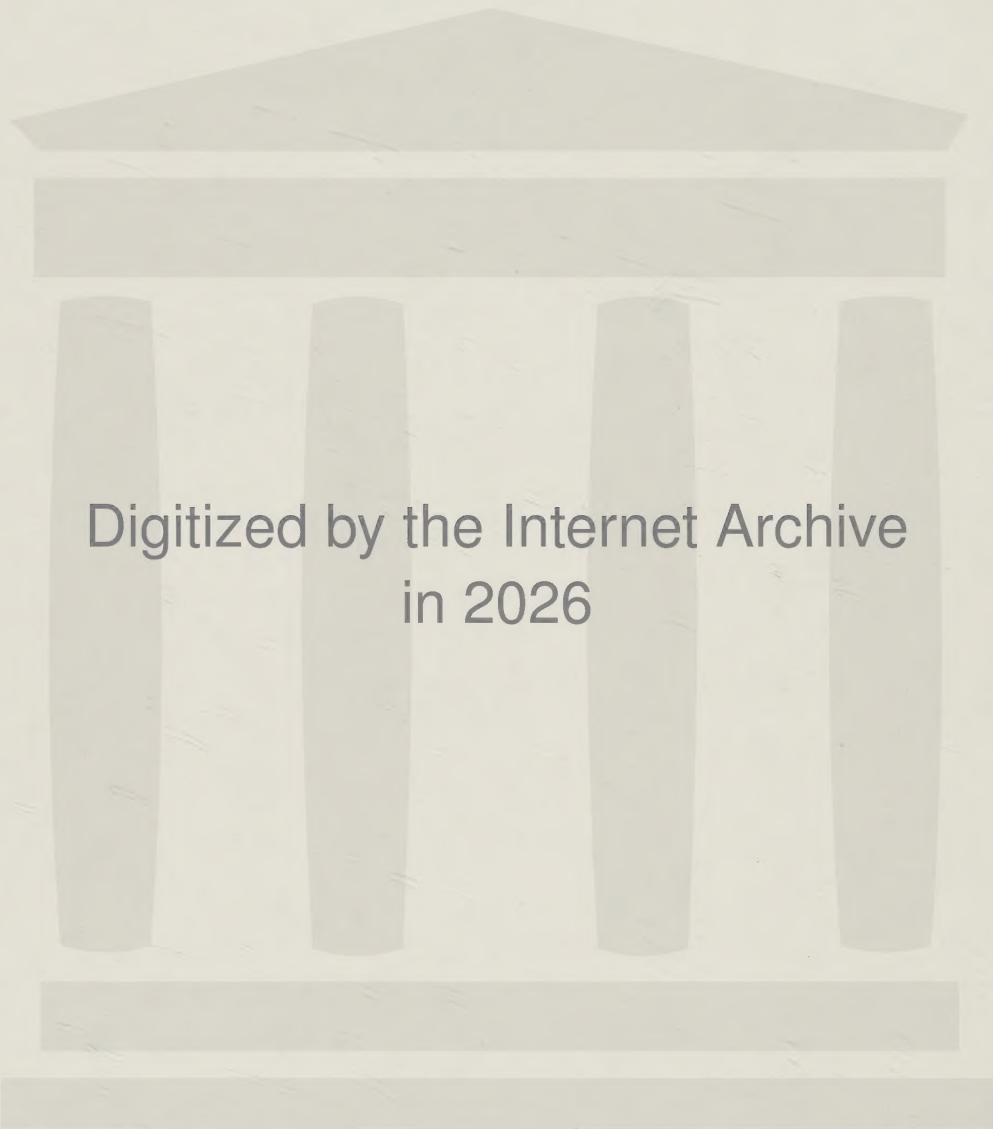


W. Trenlin

Frankfurt 1976



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550826_0038

Untersuchungen an einem Heisenberg-Ferromagneten
mit räumlich anisotroper Nächstnachbarwechselwirkung

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main



von

Wilhelm Treplin

aus Tönning/Kr. Nordfriesland

Frankfurt am Main 1976



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main.

Dekan: Prof. Dr. H. Klein

1. Berichterstatter: Prof. Dr. R.J. Jelitto

2. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Haug

Tag der mündlichen Prüfung: 3. 11. 1976

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	1
2. Beschreibung des Modells	5
3. Eine obere Schranke für die Magnetisierung des Modells (2.2)	10
3.1. Lemma von BOGOLIUBOV	10
3.2. Anwendung des Lemmas auf das Modell (2.2)	11
3.3. Die obere Schranke der spontanen Magnetisierung in einigen Strukturen	15
3.4. Vergleich der Resultate	25
4. Die Behandlung des Modells (2.2) in einer Näherung im Rahmen der Theorie der Greenschen Funktionen	29
4.1. Eine kurze Darstellung der Theorie der Greenschen Funktionen	30
4.2. Die Näherung	37
4.3. Das Gleichungssystem zur Bestimmung der Magnetisierung und der transversalen Korrelationsfunktionen	43
4.4. Curie-Temperatur. Suszeptibilität und Nächstnachbarkorrelationen im paramagnetischen Temperaturbereich	47
4.5. Die Tieftemperaturphase	56
4.5.1. Näherungen für sehr tiefe Temperaturen	56
4.5.1.1. Schwach gekoppelte Netzebenen ($I_{\perp} \ll I_{\parallel}$)	60
4.5.1.2. Schwach gekoppelte Spinketten ($I_{\parallel} \ll I_{\perp}$)	64
4.5.2. Näherungen für Temperaturen unterhalb des Curie-Punktes	68
4.5.2.1. Schwach gekoppelte Netzebenen ($I_{\perp} \ll I_{\parallel}$)	70
4.5.2.2. Schwach gekoppelte Spinketten ($I_{\parallel} \ll I_{\perp}$)	73

4.6. Die numerischen Lösungen der Gleichungssysteme für die spontane Magnetisierung, die Renormierungsfaktoren und die Nächstnachbarkorrelationen	76
4.6.1. Anmerkungen zur numerischen Auswertung	77
4.6.2. Die spontane Magnetisierung	78
4.6.3. Die Renormalisierung der Spinwellenenergie	87
4.6.4. Die Nächstnachbarkorrelationen	92
5. Zusammenfassung und kritische Beurteilung der Näherung	104
Anhang 1: Berechnung des Kommutators $[[s_k^+, \mathcal{H}], s_k^-]$ in der Ungleichung (3.2.3)	112
Anhang 2: Anmerkungen zur Auswertung des Integrals in (3.2.19) und die Anwendung auf einige Strukturen in den drei kubischen Raumgittern	113
Anhang 3: Beweis der Behauptungen (4.4.6a,b)	121
Anhang 4: Asymptotische Tieftemperaturentwicklungen für schwach gekoppelte Netzebenen und schwach gekoppelte Spinketten	126
Anhang 5: Näherungen unterhalb der Curie-Temperatur	135
Literaturhinweise	144
Lebenslauf	147

1. Einleitung

Untersuchungen an einem Modell, das auch zur Beschreibung magnetischer Eigenschaften von ein- und zweidimensionalen Festkörpern herangezogen werden kann, scheinen auf den ersten Blick ohne realistischen Hintergrund zu sein, da sich derartige Kristalle in Wirklichkeit nicht herstellen lassen. Aber zum einen bestehen außerordentlich große Schwierigkeiten, um für die meisten Modellsysteme in zwei und drei Dimensionen zu exakten Resultaten zu gelangen. Daher sollen die Untersuchungen an niederdimensionalen Modellen dazu dienen, einen Einblick in die mathematische Behandlung von Phasenübergängen zu gewinnen, von der man sich erhofft, daß sie sich auch auf realistische Systeme übertragen läßt.

Zum anderen haben gerade in den letzten Jahren eine Reihe von magnetischen Stoffen Beachtung gefunden, die sich als "nahezu" ein- bzw. zweidimensionale Magnete charakterisieren lassen. Dabei soll die Bezeichnung "nahezu" bedeuten, daß es sich bei diesen Festkörpern zwar um gewöhnliche dreidimensionale Kristalle handelt, bei denen aber eine Wechselwirkung zwischen den für die magnetischen Eigenschaften verantwortlichen Bausteinen im wesentlichen nur in einer bzw. zwei Dimensionen besteht. Dies kann zum Beispiel dadurch realisiert sein, daß Ketten von Ionen, die magnetische Momente tragen, im Kristall durch Bereiche nichtmagnetischer Ionen voneinander getrennt werden oder daß zwischen mit magnetischen Momenten besetzten Netzebenen mehrere unmagnetische Netzebenen liegen. Eine große Anzahl solcher, sowohl anorganischer als auch organischer Verbindungen sind mit einer Zusammenstellung von Meßergebnissen von DE JONGH und MIEDEMA (1974) angegeben worden. Dabei überwiegen in den Kettenstrukturen Antiferromagnete, während in den ebenen Strukturen Antiferromagnete in etwa gleicher Häufigkeit anzutreffen sind.

Ein Teil dieser Festkörper kann in seinen magnetischen Eigenschaften in guter Näherung durch den Modelloperator

$$(1.1) \quad \mathcal{H} = - \sum_{m,n} J(|\vec{r}_m - \vec{r}_n|) \vec{S}_m \cdot \vec{S}_n$$

von HEISENBERG (1928) und DIRAC (1929) für Systeme lokalisier-

ter magnetischer Momente beschrieben werden. Im Gegensatz zum ein- und zum zweidimensionalen Ising-Modell mit Nächstnachbarwechselwirkung, das ISING (1925) bzw. ONSAGER (1944) behandeln, ist eine entsprechende Lösung für den Operator (1.1) bislang noch für keine Dimension gelungen. Die wenigen gesicherten Ergebnisse für das ein- und für das zweidimensionale Modell beziehen sich unter anderem auf das Fehlen einer spontanen Magnetisierung für alle von Null verschiedenen Temperaturen (MERMIN und WAGNER (1966)), auf den Grundzustand der linearen Kette mit Nächstnachbarwechselwirkung für $I(\vec{\delta}) < 0$ (HULTHÉN (1938)), wobei allerdings über eine eventuell vorhandene Ordnung in dem System auch schon keine Aussage mehr gemacht werden kann, sowie auf Anteile des Spektrums von (1.1). Dabei untersuchte BLOCH (1930) die elementaren Anregungen über dem Grundzustand eines Ferromagneten, die sogenannten Spinwellen. Gebundene Zustände für die ferromagnetische lineare Kette mit Nächstnachbarwechselwirkung ($I(\vec{\delta}) > 0$) fand erstmals BETHE (1931), eine entsprechende Verallgemeinerung auf höherdimensionale Systeme gelang WORTIS (1963) und HANUS (1963).

Will man jedoch Einsicht in das Verhalten von thermodynamischen Größen gewinnen, so bleibt man auf Näherungsverfahren angewiesen, deren Güte dann aus einem Vergleich der Resultate mit Meßergebnissen an Modellsubstanzen zu beurteilen ist.

So äußerten STANLEY und KAPLAN (1966) aufgrund einer Hochtemperaturentwicklung der Suszeptibilität die Vermutung eines Phasenüberganges in einem zweidimensionalen Heisenberg-Ferromagneten, den auch MERMIN und WAGNER nicht ausschließen können, und MUBAYI und LANGE (1969) fanden in einer Näherung mittels der Theorie der Greenschen Funktionen für den zweidimensionalen Ferromagneten mit Nächstnachbarwechselwirkung eine Divergenz der Nullfeld-Suszeptibilität bei einer von Null verschiedenen Temperatur und eine Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung. Allerdings führt diese Näherungsmethode für einen Teil der Korrelationsfunktionen auf Ergebnisse, die mit der anschaulichen Vorstellung von einem Ferromagneten nicht zu vereinbaren sind, worauf KENAN (1970) in einem Kommentar hinwies.

Der Klärung der Fragen, inwieweit diese Näherung nicht

gleichwohl zu einer möglichen Beschreibung von Eigenschaften der eingangs erwähnten quasi-ein- und-zweidimensionalen Magnete dienen kann und wie eventuell die gefundene Divergenz der Suszeptibilität im zweidimensionalen Fall und die unbefriedigenden Ergebnisse für die Korrelationen zu erklären sind, dient der Überwiegende Teil dieser Arbeit. Dazu wird im zweiten Kapitel eine spezielle Form des Operators (1.1) eingeführt, die es erlaubt, auch nahezu ein- und zweidimensionale ferromagnetische Systeme zu untersuchen und einen Übergang zu den niederdimensionalen Modellen vorzunehmen. Daneben werden die Elementaranregungen auf dem Grundzustand angegeben, die wir später in unserer Näherung in modifizierter Form wiederfinden werden, sowie einige Beziehungen zusammengestellt, die in der durch das Spinsystem gegebenen Algebra gelten und im Verlauf der Untersuchungen mehrfach benötigt werden.

Bevor wir das Verhalten einiger thermodynamischer Größen selbst untersuchen werden, wollen wir noch in einem gesonderten Kapitel nach der Methode von MERMIN und WAGNER für unser Modell eine obere Schranke der spontanen Magnetisierung herleiten, um einen Einblick zu gewinnen, in welcher funktionalen Abhängigkeit diese beim Übergang zu ein- und zu zweidimensionalen Systemen in einigen Strukturen verschwindet.

In dem vierten Kapitel werden wir dann mittels der Theorie der Greenschen Funktionen eine Näherungslösung für unser Modell herleiten, indem wir die Entkopplung der Bewegungsgleichungen in der Weise vornehmen, wie es MUBAYI und LANGE bei der Behandlung des zweidimensionalen Modells getan haben, und die identisch mit derjenigen ist, die von ROTH (1968) vorgeschlagen wurde.

Die Magnetisierung und die Korrelationen benachbarter Spins in der ferromagnetischen Phase einerseits und die Korrelationen und die Suszeptibilität in der paramagnetischen Phase andererseits genügen einem System gekoppelter transzendenter Gleichungen, das im allgemeinen numerisch zu lösen ist, doch lassen sich Curie-Temperatur und Suszeptibilität analytisch angeben.

In den Bereichen sehr tiefer Temperatur und unmittelbar unterhalb der Curie-Temperatur leiten wir asymptotische Entwicklungen für die einzelnen Größen her oder geben, soweit

dies nicht möglich ist, für jede von ihnen eine transzendente Bestimmungsgleichung an. Gesonderte Untersuchungen gelten jeweils den beiden Fällen extremer Anisotropie in der Austauschwechselwirkung und den Grenzübergängen zum zwei- und zum ein-dimensionalen Modell. Dabei führen wir in vielen Fällen einen Vergleich mit den Ergebnissen durch, die eine Entkopplung der Greenschen Funktionen in der von BOGOLIUBOV und TYABLIKOV (1959) angewandten Form liefert und die im isotropen dreidimensionalen System als eine recht brauchbare Näherung anzusehen sind. Anschließend diskutieren wir die numerisch gewonnenen Lösungen für die spontane Magnetisierung und die Nachbarkorrelationen, aus deren Temperaturabhängigkeit sich Aussagen über die Güte der durchgeführten Näherung ableiten lassen.

Den Abschluß der vorliegenden Arbeit bildet neben einer Zusammenfassung eine Kritik des angewandten Näherungsverfahrens, die im wesentlichen auf den Ergebnissen für die Suszeptibilität und die Korrelationen beruht und bei wachsender Anisotropie auch auf die Approximation nach BOGOLIUBOV und TYABLIKOV ausgedehnt werden muß.

Um die wesentlichen Gedankengänge in den Untersuchungen nicht allzusehr zu unterbrechen, sind einige, zum Teil etwas langwierige Rechnungen aus dem Hauptteil der Arbeit herausgenommen und in Anhängen wiedergegeben worden.

2. Beschreibung des Modells

Als Modell, das uns zur Beschreibung von quasi-ein- und quasi-zweidimensionalen Ferromagneten mit lokalisierten Momenten dienen soll, wählen wir ein dreidimensionales Bravaisgitter, an dessen Gitterplätzen $\vec{n}=(n_1, n_2, n_3)$ Elektronen "befestigt" sind, deren Spins die Länge $S=1/2$ besitzen. Die Spins an den unterschiedlichen Gitterplätzen $\vec{n}$ und $\vec{m}$ seien über die Austauschwechselwirkung $I(\vec{m}, \vec{n})$ miteinander gekoppelt.

Bei Anwesenheit eines äußeren homogenen Magnetfeldes H in Richtung der negativen z -Achse möge der spinabhängige Anteil der Energie unseres Systems durch

$$(2.1a) \quad \mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{m}, \vec{n}} I(\vec{m}, \vec{n}) \vec{S}_{\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} + g\mu_B H \sum_{\vec{n}} s_n^z$$

gegeben sein. Dabei bezeichnen μ_B den Wert des Bohrschen Magnetons und g den Landé-Faktor sowie s_n^z die z -Komponente des Operators $\vec{S}_{\vec{n}}=(s_n^x, s_n^y, s_n^z)$ für den Spin am Gitterplatz $\vec{n}$. Setzen wir noch voraus, daß $I(\vec{m}, \vec{n})$ wegen der Punktsymmetrie des Gitters lediglich eine Funktion des Abstandes $|\vec{m}-\vec{n}|$ der Gitterplätze $\vec{m}$ und $\vec{n}$ ist, so stellt

$$(2.1b) \quad \mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{m}, \vec{n}} I(|\vec{m}-\vec{n}|) \vec{S}_{\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}} + g\mu_B H \sum_{\vec{n}} s_n^z$$

den Operator des normalen isotropen Heisenberg-Modells dar. Wir wollen ferner annehmen, daß lediglich die Kopplung zwischen unmittelbar benachbarten Spins einen von Null verschiedenen Wert besitzt und begründen diese Einschränkung mit der Erwartung, daß die Austauschwechselwirkung exponentiell mit dem Abstand der Wechselwirkungspartner abfällt. Da zudem das Modell nur auf Ferromagnete Anwendung finden soll, möge die Kopplung $I(|\vec{m}-\vec{n}|)$ für benachbarte Gitterplätze $\vec{m}$ und $\vec{n}$ nur positive Werte annehmen, weil in diesem Fall eine zueinander parallele Ausrichtung der Spins energetisch begünstigt wird. Um jedoch eine Beschreibung von quasi-ein- und quasi-zweidimensionalen Ferromagneten zu ermöglichen, müssen wir die Beschränkung auf eine isotrope Austauschwechselwirkung in dem Operator (2.1b) aufgeben. Wir nehmen jetzt an, daß die Kopplung $I(|\vec{m}-\vec{n}|)$ zwischen benachbarten Spins unterschiedliche Werte besitzen kann. Dazu sehen wir das Gitter als eine Schar

paralleler Netzebenen an, die dadurch festzulegen sind, daß ein Spin zusammen mit mindestens zwei seiner nächsten Nachbarn in derselben Netzebene liegt. Mit diesen sei er über $I_{\parallel}$ gekoppelt, während die Austauschwechselwirkung mit den übrigen nächsten Nachbarn durch die Größe $I_{\perp}$ gegeben sein möge. Damit erhält der für unsere Zwecke geeignete Operator der Form (2.1b) die Gestalt

$$(2.2) \quad \mathcal{H} = -I_{\parallel} \sum_{\vec{n}, \vec{\delta}_{\parallel}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{n}+\vec{\delta}_{\parallel}} - I_{\perp} \sum_{\vec{n}, \vec{\delta}_{\perp}} \vec{S}_{\vec{n}} \vec{S}_{\vec{n}+\vec{\delta}_{\perp}} + H' \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z$$

wobei die Abkürzung $H' = g\mu_B H$ eingeführt wurde.

Einen nahezu zweidimensionalen Ferromagneten können wir nunmehr mit (2.2) beschreiben, wenn die Anzahl der Nächstnachbarvektoren $\vec{\delta}_{\parallel}$ größer als zwei und die Kopplung $I_{\perp}$ sehr klein im Vergleich zu $I_{\parallel}$ ist. Für ein Modell eines quasi-eindimensionalen Magneten muß bei einer gewählten Netzebenenstruktur die Anzahl der verschiedenen $\vec{\delta}_{\parallel}$ genau zwei sein und wiederum $I_{\perp} \ll I_{\parallel}$ gelten. Betrachten wir speziell einen Spin $\vec{S}_{\vec{n}}$ am Ort $\vec{n}$ einer der $\{100\}$ -Netzebenen des kubisch-einfachen Gitters, so stellt der Fall $I_{\perp} \ll I_{\parallel}$ einen nahezu zwei- und $I_{\parallel} \ll I_{\perp}$ einen nahezu eindimensionalen Ferromagneten dar. Als Spezialfälle sind in (2.2) also neben dem isotropen dreidimensionalen Modell ($I_{\parallel} = I_{\perp}$) der zweidimensionale Ferromagnet in einem quadratischen Gitter ($I_{\perp} = 0$) und für $I_{\parallel} = 0$ die lineare Kette enthalten. Obwohl wir für nichtverschwindende Kopplungen $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ immer ein dreidimensionales Modell untersuchen, erwarten wir doch für das Verhalten von thermodynamischen Größen bei einer sehr starken Anisotropie $I_{\perp} \ll I_{\parallel}$ oder $I_{\parallel} \ll I_{\perp}$ in der Kopplung bereits einen starken Einfluß der niedrigeren Dimension.

Für die Bestimmung der Curie-Temperatur eines anisotropen Systems - unter der Bezeichnung Anisotropie soll im weiteren, sofern es nicht ausdrücklich anders vermerkt wird, immer nur die Ungleichheit der Wechselwirkungen $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ verstanden werden - hat bereits LINES (1964) das Modell (2.2) herangezogen. Seine Untersuchungen ergaben unter anderem, daß die Curie-Temperatur eines zweidimensionalen Ferromagneten gleich Null oder verschieden von Null ist, je nachdem welche Näherungsmethode gewählt wurde.

Eine modifizierte Form von (2.2), wobei in einem kubisch-einfachen Gitter neben einer ausgeprägten Anisotropie $I_{\perp} \ll I_{\parallel}$ noch die Möglichkeit einer geringen Anisotropie der Kopplung im Spinraum zugelassen wurde, untersuchte MIKESKA (1973) in einer Näherung, die eine Erweiterung des von MUBAYI und LANGE angewandten Verfahrens auf das von ihm betrachtete Modell darstellt. Daher wird die Möglichkeit gegeben sein, seine Resultate mit einem Teil unserer Ergebnisse zu vergleichen.

Einen Einfluß der Oberfläche des Bravaisgitters auf die Eigenschaften unseres Modells wollen wir ausschließen und führen deshalb mit

$$(2.3) \quad (n_1 + N_1, n_2, n_3) = (n_1, n_2, n_3), \quad (n_1, n_2 + N_2, n_3) = (n_1, n_2, n_3), \quad (n_1, n_2, n_3 + N_3) = (n_1, n_2, n_3)$$

$$N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = N$$

N: Gesamtzahl der Spins

periodische Randbedingungen ein. Deshalb können wir mittels der Fouriertransformation

$$(2.4a) \quad \vec{S}_k = \sum_n e^{-ikn} \vec{S}_n, \quad J_{\parallel, \perp}(\vec{k}) = \sum_{\delta_{\parallel, \perp}} I_{\parallel, \perp} e^{-ik\delta_{\parallel, \perp}}$$

mit ihrer Umkehrung

$$(2.4b) \quad \vec{S}_n = \frac{1}{N} \sum_k e^{ikn} \vec{S}_k, \quad I_{\parallel, \perp} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik\delta_{\parallel, \perp}} J_{\parallel, \perp}(\vec{k})$$

nach Einführung der Spinumklappoperatoren

$$(2.5) \quad S_n^+ = S_n^x + iS_n^y, \quad S_n^- = S_n^x - iS_n^y$$

die Impulsdarstellung von (2.2) mit

$$(2.6) \quad \mathcal{H} = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (J_{\parallel}(\vec{k}) + J_{\perp}(\vec{k}')) (S_k^+ S_{-k}^- + S_k^z S_{-k}^z) + H' S_0^z$$

angeben, wobei über alle Vektoren $\vec{k}$ der ersten Brillouinzone des Bravaisgitters summiert wird. Bei der Herleitung von (2.6) benutzten wir die Vollständigkeitsrelation

$$(2.7) \quad \sum_n e^{ikn} = N \delta_{k,0} \quad \delta_{k,0} : \text{Kroneckersymbol,}$$

die durch die Inversionssymmetrie des Gitters bedingte Gleichheit von $J_{\parallel}(\vec{k})$ mit $J_{\parallel}(-\vec{k})$ und $J_{\perp}(\vec{k})$ mit $J_{\perp}(-\vec{k})$, die mittels (2.7) abzuleitenden Beziehungen $\sum_{\vec{k}} J_{\parallel}(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}} J_{\perp}(\vec{k}) = 0$ sowie Vertauschungsrelationen zwischen den zusammen mit der Eins eine Algebra bildenden Operatoren s_n^+ , s_n^- , s_n^z . Diese in der Folge mehrfach verwendeten Kommutatoren wollen wir mit

$$(2.8a) \quad [s_m^z, s_n^{\pm}] = \pm s_n^{\pm} \delta_{mn}, \quad [s_m^+, s_n^-] = 2 s_n^z \delta_{mn}$$

und ihrer Entsprechung in der Impulsdarstellung

$$(2.8b) \quad [s_k^z, s_{k'}^{\pm}] = \pm s_{k+k'}^{\pm}, \quad [s_k^+, s_{k'}^-] = 2 s_{k+k'}^z,$$

bereits an dieser Stelle festhalten.

Wie wir schon einleitend ankündigten, werden wir in diesem Abschnitt auch noch die elementaren Anregungen über dem Grundzustand des durch (2.2) beschriebenen Systems angeben. Da der Anteil $M = \sum_n s_n^z$ des Operators (2.2) mit $\mathcal{H}$ vertauscht, ist der nichtentartete Eigenzustand von M , in dem sämtliche Spins in die negative Richtung der z-Achse weisen, auch Eigenzustand von $\mathcal{H}$, und da wir die Austauschwechselwirkungen als positiv vorausgesetzt haben, handelt es sich um den Grundzustand des Systems, den wir mit $|0\rangle$ kennzeichnen wollen. Sein Eigenwert sei E_0 und damit gilt

$$(2.9) \quad \mathcal{H}|0\rangle = E_0|0\rangle.$$

Klappen wir am Gitterplatz $\vec{n}$ einen Spin um, so erhalten wir einen weiteren Eigenzustand $|\vec{n}\rangle = s_n^+|0\rangle$ von M wegen

$$(2.10) \quad \begin{aligned} M|\vec{n}\rangle &= M s_n^+|0\rangle = [M, s_n^+]|0\rangle + s_n^+ M|0\rangle \\ &= s_n^+|0\rangle - \frac{N}{2} s_n^+|0\rangle = -\frac{1}{2}(N-2)|\vec{n}\rangle, \end{aligned}$$

so daß die Eigenwerte von M bezüglich aller Gitterplätze $\vec{n}$ miteinander entartet sind. Diese Eigenzustände $|\vec{n}\rangle$ bilden einen N -dimensionalen Unterraum des Hilbertraums, und demnach müssen sich Linearkombinationen

$$(2.11) \quad |\vec{k}\rangle = \sum_n c_n |\vec{n}\rangle$$

angeben lassen, die Eigenzustände von $\mathcal{H}$ sind. Aufgrund der Translationsinvarianz des Gitters lassen sich die Entwicklungskoeffizienten schnell mit

$$(2.12) \quad c_n^k = e^{-ikn}$$

finden, wobei $\vec{k}$ alle Vektoren der Brillouinzone des reziproken Gitters durchläuft. In der Impulsdarstellung sind somit wegen (2.4a) als Eigenzustände von $\mathcal{H}$ die Spinwellen (2.11) durch

$$(2.13) \quad |\vec{k}\rangle = \sum_n e^{-ikn} |\vec{n}\rangle = s_k^+ |0\rangle$$

gegeben. Die zugehörigen Eigenwerte $E(\vec{k})$ von

$$(2.14) \quad \mathcal{H} |\vec{k}\rangle = E(\vec{k}) |\vec{k}\rangle$$

bestimmen sich über

$$(2.15) \quad \mathcal{H} |\vec{k}\rangle = \mathcal{H} s_k^+ |0\rangle = [\mathcal{H}, s_k^+] |0\rangle + s_k^+ \mathcal{H} |0\rangle = [\mathcal{H}, s_k^+] |0\rangle + E_0 |\vec{k}\rangle$$

mittels der Impulsdarstellung (2.6) von $\mathcal{H}$ und den Vertauschungsrelationen (2.8b) sowie (2.4a) zu

$$(2.16) \quad E(\vec{k}) = E_0 + H' + (J_{||}(0) - J_{||}(\vec{k})) + (J_{\perp}(0) - J_{\perp}(\vec{k})).$$

Nach Einführung des Modells und der Zusammenstellung einiger grundlegender Beziehungen sind wir jetzt in der Lage, für den anisotropen Heisenberg-Ferromagneten eine obere Schranke für die Magnetisierung herzuleiten. Dieser Aufgabe wollen wir uns in dem nun folgenden Kapitel zuwenden.

3. Eine obere Schranke für die Magnetisierung des Modells (2.2)

Für das im vorigen Kapitel vorgestellte Modell eines anisotropen Heisenberg-Ferromagneten wollen wir eine obere Schranke der Magnetisierung ableiten und hoffen dabei, daß wir das Ergebnis auch in Hinblick auf das Verschwinden der spontanen Magnetisierung beim Übergang zu einem zwei- bzw. eindimensionalen System interpretieren können. Hierbei fußen wir auf einer Abschätzung, die MERMIN und WAGNER (1966) den Beweis ermöglichte, daß sich in ein- und zweidimensionalen, im Spinraum isotropen Heisenberg-Modellen keine langreichweitige ferro- oder antiferromagnetische Ordnung ausbilden kann, sofern nur die Austauschwechselwirkung zwischen den Spins hinreichend schnell abnimmt. Ausgegangen wird bei dieser Abschätzung von einem Lemma von BOGOLIUBOV (1962).

3.1. Lemma von BOGOLIUBOV

Dieses Lemma lautet:

Sei H ein unitärer Vektorraum endlicher Dimension, $\mathcal{K}$ ein selbstadjungierter Operator, $\beta > 0$ und

$$(3.1.1) \quad \langle X \rangle = \frac{\text{Spur} (X e^{-\beta \mathcal{K}})}{\text{Spur} (e^{-\beta \mathcal{K}})}$$

für einen Operator X in H . Dann gilt für alle Operatoren A und C in H die Ungleichung

$$(3.1.2) \quad \frac{1}{2} \beta \langle AA^+ + A^+A \rangle \langle [[C, \mathcal{K}], C^+] \rangle \geq |\langle [C, A] \rangle|^2.$$

Diese Beziehung folgt aus der Schwarzschen Ungleichung

$$(3.1.3) \quad (A, A)(B, B) \geq |(A, B)|^2$$

für Skalarprodukte (A, B) eines unitären Vektorraumes, wenn man diese durch

$$(3.1.4) \quad (A, B) = \sum'_{m,n} (\varphi_m, A^+ \varphi_n) (\varphi_n, B \varphi_m) \frac{W_n - W_m}{E_m - E_n}$$

definiert. Dabei bedeuten E_m die Eigenwerte und φ_m die zugehörigen normierten Eigenvektoren von $\mathcal{K}$, $W_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\text{Spur}(e^{-\beta \mathcal{K}})}$,

sowie A und B Operatoren in H. Die Summation in (3.1.4) umfaßt alle Paare von Eigenzuständen mit Ausnahme von Paaren aus demselben Eigenraum. Nutzt man die Ungleichung

$$(3.1.5) \quad (A, A) \leq \frac{\beta}{2} \langle AA^+ + A^+A \rangle$$

aus, die wegen

$$(3.1.6) \quad 0 \leq \frac{W_n - W_m}{E_m - E_n} = \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\text{Spur}(e^{-\beta \mathcal{H}})(E_m - E_n)} = \frac{1}{\text{Spur}(e^{-\beta \mathcal{H}})} \cdot \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}} \cdot \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{E_m - E_n}$$

$$= \frac{1}{\text{Spur}(e^{-\beta \mathcal{H}})} \tanh\left(\frac{\beta(E_m - E_n)}{2}\right) \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{E_m - E_n} \leq \frac{1}{\text{Spur}(e^{-\beta \mathcal{H}})} \frac{\beta}{2} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) = \frac{\beta}{2} (W_n + W_m)$$

für $E_n < E_m$ aus (3.1.4) folgt, und wählt speziell $B = [C^+, \mathcal{H}]$, so gelangt man zur Beziehung (3.1.2).

3.2. Anwendung des Lemma auf das Modell (2.2)

Als den selbstadjungierten Operator $\mathcal{H}$ wählen wir bei der Anwendung des Lemmas unseren Modelloperator (2.2) in der Impulsdarstellung (2.6), der Vektorraum ist

$$(3.2.1) \quad H = \bigotimes_n H_n,$$

das direkte Produkt der von den Paulischen Spin-1/2-Matrizen und der Einheitsmatrix aufgespannten Räume H_n , in denen die Spinoperatoren erklärt sind. Für die Operatoren setzen wir Spinumklappoperatoren

$$(3.2.2) \quad A = s_{-k}^-, \quad C = s_k^+$$

in der Impulsdarstellung ein. Damit stellt sich uns die Aufgabe, die Beziehung

$$(3.2.3) \quad \langle s_{-k}^- s_k^+ + s_k^+ s_{-k}^- \rangle \langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle \geq \frac{2}{\beta} |\langle [s_k^+, s_{-k}^-] \rangle|^2$$

zu untersuchen.

Eine direkte, aber etwas längliche Rechnung, die im Anhang 1

wiedergegeben ist, liefert als Ergebnis für den Kommutator

$$[[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-]$$

$$(3.2.4) \quad [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] = \frac{4}{N} \sum_{k'} (I_{\parallel}(\vec{k}') - I_{\parallel}(\vec{k}' - \vec{k}) + I_{\perp}(\vec{k}') - I_{\perp}(\vec{k}' - \vec{k})) (4s_{-k'}^z s_{k'}^z + \{s_{k'}^+, s_{-k'}^-\}_+) - 2H' s_0^z.$$

Der Mittelwert $\langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle$ dieser Größe ist kraft Definition (3.1.4) nicht negativ und damit natürlich auch nicht der Ausdruck, den man durch das Ersetzen von $\vec{k}$ durch $-\vec{k}$ in (3.2.4) erhält. Daher finden wir wegen

$$(3.2.5) \quad \langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle \leq \langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle + \langle [[s_{-k}^+, \mathcal{H}], s_k^-] \rangle$$

die Ungleichung

$$\langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle$$

$$(3.2.6)$$

$$\leq \frac{2}{N} \sum_{k'} [I_{\parallel} \sum_{\delta_{\parallel}} e^{-ik'\delta_{\parallel}} (1 - \cos(\vec{k}\vec{\delta}_{\parallel})) + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} e^{-ik'\delta_{\perp}} (1 - \cos(\vec{k}\vec{\delta}_{\perp}))] \langle 4s_{-k'}^z s_{k'}^z + \{s_{k'}^+, s_{-k'}^-\}_+ \rangle - 4H' \langle s_0^z \rangle.$$

Eine weitere Abschätzung können wir durch die Anwendung der Dreiecksungleichung mit

$$\langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle$$

$$(3.2.7)$$

$$\leq \frac{2}{N} \sum_{k'} [I_{\parallel} \sum_{\delta_{\parallel}} (1 - \cos(\vec{k}\vec{\delta}_{\parallel})) + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (1 - \cos(\vec{k}\vec{\delta}_{\perp}))] | \langle 4s_{-k'}^z s_{k'}^z + \{s_{k'}^+, s_{-k'}^-\}_+ \rangle | + 4 | H' \langle s_0^z \rangle |$$

gewinnen. Nun kann aber der Mittelwert $\langle AA^+ \rangle$ ebenfalls keine negativen Werte annehmen, und somit erhalten wir unter Ausnutzung der Translationsinvarianz sowie der Beziehung

$$(3.2.8) \quad \vec{s}_n \vec{s}_n = s(s+1) \cdot \underline{1} = \frac{3}{4} \cdot \underline{1}$$

die Ungleichung

$$(3.2.9) \quad \sum_{k'} \langle 4s_{-k'}^z s_{k'}^z + \{s_{k'}^+, s_{-k'}^-\}_+ \rangle \leq 4N^2 s(s+1) = 3N^2.$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in (3.2.7) führt auf die Beziehung

$$(3.2.10) \quad \langle [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] \rangle \leq 6N \left\{ I_{\parallel} \sum_{\delta_{\parallel}} (1 - \cos(\vec{k}\vec{\delta}_{\parallel})) + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (1 - \cos(\vec{k}\vec{\delta}_{\perp})) \right\} + 4N | H' \langle s_{n=0}^z \rangle |,$$

und unter Verwendung der Ungleichung

$$(3.2.11) \quad \cos x \geq 1 - \frac{x^2}{2}$$

ergibt sich schließlich das Resultat

$$(3.2.12) \quad \langle [s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^- \rangle \leq 3N \left\{ I_{||} \sum_{\delta_{||}} (\vec{k}\vec{\delta}_{||})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k}\vec{\delta}_{\perp})^2 \right\} + 4N |H' \langle s_{n=0}^z \rangle|.$$

Diese Abschätzung für den Mittelwert $\langle [s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^- \rangle$ berücksichtigen wir in (3.2.3) und erhalten

$$(3.2.13) \quad \langle s_{-k}^- s_k^+ + s_k^+ s_{-k}^- \rangle \geq \frac{8N\beta^{-1} |\langle s_{n=0}^z \rangle|^2}{3 \left\{ I_{||} \sum_{\delta_{||}} (\vec{k}\vec{\delta}_{||})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k}\vec{\delta}_{\perp})^2 \right\} + 4 |H' \langle s_{n=0}^z \rangle|}.$$

Summieren wir jetzt auf beiden Seiten von (3.2.13) über alle Vektoren $\vec{k}$ der ersten Brillouin-Zone, so gewinnen wir wegen

$$(3.2.14) \quad \sum_{\vec{k}} \langle s_{-k}^- s_k^+ + s_k^+ s_{-k}^- \rangle \leq 2N^2 S(S+1) = \frac{3}{2} N^2$$

für die Magnetisierung $\sigma(H')$ pro Teilchen, unter der wir den Mittelwert

$$(3.2.15) \quad \sigma = \frac{1}{N} \langle \sum_n s_n^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \langle s_n^z \rangle = \langle s_n^z \rangle$$

verstehen wollen, die Ungleichung

$$(3.2.16) \quad \sigma^2(H') \leq \frac{q}{16} \beta \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{I_{||} \sum_{\delta_{||}} (\vec{k}\vec{\delta}_{||})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k}\vec{\delta}_{\perp})^2 + \frac{4}{3} |H' \sigma(H')|} \right]^{-1}.$$

Im Fall $N \rightarrow \infty$ ersetzen wir in (3.2.16) die Summe durch ein Integral und erhalten

$$(3.2.17) \quad \sigma^2(H') \leq \frac{q}{16} \beta \left[\int_{\mathcal{B}} \frac{N_c}{(2\pi)^3} d^3k \frac{1}{I_{||} \sum_{\delta_{||}} (\vec{k}\vec{\delta}_{||})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k}\vec{\delta}_{\perp})^2 + a^2} \right]^{-1}.$$

mit der Abkürzung

$$a^2 = \frac{4}{3} |H' \sigma(H')|.$$

Ferner bedeuten v_c das Volumen der Einheitszelle des Bravaisgitters und $\mathcal{B}$ die Brillouin-Zone des zugehörigen reziproken

Gitters.

Die transzendente Ungleichung (3.2.17) für die Magnetisierung kann zur Bestimmung einer oberen Grenze für $\sigma(H')$ herangezogen werden. Dafür ist sie aber ohne Bedeutung, wenn ihre rechte Seite das Quadrat der Spinquantenzahl, den maximalen Wert von σ^2 , überschreitet, was bei hinreichend tiefen Temperaturen immer eintritt. Zudem ist ihr Nutzen am größten, wenn das äußere Magnetfeld H' und damit auch die Größe a^2 verschwindet, weil der Integrand eine monoton fallende Funktion von H' ist. Damit gelang man zu einer oberen Schranke für die spontane Magnetisierung

$$(3.2.18) \quad \sigma \leq \frac{3}{4} \sqrt{\beta} f(I_{\parallel}, I_{\perp})$$

mit

$$(3.2.19) \quad f(I_{\parallel}, I_{\perp}) = \left[\frac{N_c}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{I_{\parallel} \sum_{\delta_{\parallel}} (\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{\parallel})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{\perp})^2} \right]^{-1/2}.$$

MERMIN und WAGNER konnten so das Ausbleiben einer spontanen Magnetisierung in ein- und zweidimensionalen Systemen wegen der Divergenz des Integrals in (3.2.19) nachweisen. Will man die Abhängigkeit der Schranke für die spontane Magnetisierung von beiden Austauschwechselwirkungen $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ betrachten, so empfiehlt es sich, die lediglich vom Verhältnis $I_{\perp}/I_{\parallel}$ abhängigen Größen

$$(3.2.20) \quad g_{\parallel} \left(\frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}} \right) = \frac{f(I_{\parallel}, I_{\perp})}{\sqrt{I_{\parallel}}} \quad \text{bzw.} \quad g_{\perp} \left(\frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}} \right) = \frac{f(I_{\parallel}, I_{\perp})}{\sqrt{I_{\perp}}}$$

zu untersuchen, um, ausgehend von dem isotropen dreidimensionalen Modell, die Wirkung der Abnahme von $I_{\perp}$ mit einer entsprechenden Verringerung von $I_{\parallel}$ vergleichen zu können, und zwar ist dann $g_{\parallel}$ für $I_{\perp} < I_{\parallel}$ und $g_{\perp}$ für $I_{\parallel} < I_{\perp}$ zu wählen.

Wird mit λ das Verhältnis der Kopplungen

$$(3.2.21) \quad \lambda = \frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}}$$

bezeichnet, so lassen sich bei der Untersuchung verschiedener Strukturen für $g_{\parallel}(\lambda)$ und $g_{\perp}(\lambda)$ einfache analytische Ausdrücke

angeben, wenn man sich bei der Integration in (3.2.19) auf ein geeignetes Teilvolumen $\mathcal{V}$ der Brillouin-Zone $\mathcal{B}$ beschränkt, das für unterschiedliche Strukturen im allgemeinen verschieden gewählt werden muß. Die Ungleichung für die spontane Magnetisierung bleibt durch diese Einschränkung erhalten, lediglich die obere Schranke kann sich zu größeren Werten hin verschieben, da bei unserer Beschränkung auf ferromagnetische Systeme der Integrand in (3.2.19) keine negativen Werte annehmen kann.

3.3 Die obere Schranke der spontanen Magnetisierung in einigen Strukturen

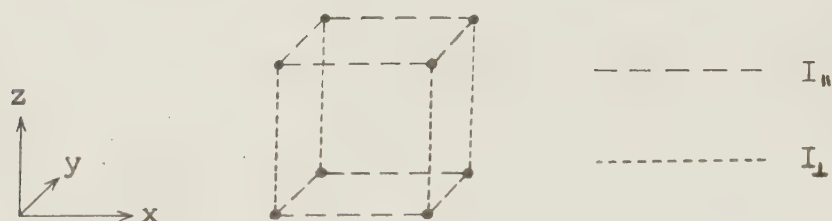
In diesem Abschnitt wollen wir jetzt die Funktionen $g_u(\lambda)$ und $g_l(\lambda)$ unter der eben angegebenen Einschränkung hinsichtlich des Integrationsbereichs für einige einfache Strukturen explizit angeben. Wir haben Beispiele aus allen drei kubischen Raumgittern ausgesucht, darunter für das kubisch-raumzentrierte Gitter zwei und für das kubisch-flächenzentrierte Gitter drei unterschiedliche Netzebenenarrangements, um in allen drei Gittern den Übergang zu einem zwei- und zu einem eindimensionalen Modell verfolgen zu können. Darüberhinaus kann an zwei Beispielen bei der Entwicklung zu Flächengittern ein eventuell vorhandener Einfluß der Koordinationszahlen in den ebenen Strukturen untersucht werden. In denjenigen Beispielen, die auch quasi-eindimensionale Systeme beschreiben, werden wir von der im zweiten Kapitel eingeführten Bezeichnungsweise abweichen. Die schwache Wechselwirkung zwischen Spins in verschiedenen linearen Ketten wollen wir mit I_u bezeichnen, während in quasi-zweidimensionalen Modellen I_l weiterhin die schwache Kopplung zwischen den Flächengittern bedeuten soll.

Für einige allgemeine Anmerkungen zur Auswertung des Integrals in (3.2.19), die Angabe der jeweiligen Teilbereiche der Brillouin-Zone, auf die wir das Integrationsgebiet beschränken, und die Ausführung der Integrationen verweisen wir auf den Anhang 2, dessen Ergebnisse wir im folgenden zusammenfassen wollen.

1. Kubisch-einfaches Gitter

Zwischen benachbarten Spins in einer (001)-Netzebene beste-

he die Kopplung $I_{\parallel}$, sonst sei ihr Wert $I_{\perp}$:



Für $I_{\perp} \rightarrow 0$ tritt eine Entkopplung in parallele quadratische Gitter, für $I_{\parallel} \rightarrow 0$ in parallele Spinketten ein. Für die Abhängigkeit der oberen Schranke für die spontane Magnetisierung von $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ erhalten wir nach (A2.11)

$$(3.3.1) \quad g_{\parallel}(\lambda) = 2\sqrt{2\pi} \left\{ \ln\left(1 + \frac{1}{\lambda}\right) + 2\sqrt{\frac{1}{\lambda}} \arctan\sqrt{\lambda} \right\}^{-1/2} \quad \text{bzw.}$$

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

als Ergebnis, das sich in den beiden Fällen extremer Anisotropie zu

$$(3.3.2a) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx 2\sqrt{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\ln\left(\frac{1}{\lambda} + 2\right)}} \quad \text{für } \lambda \ll 1$$

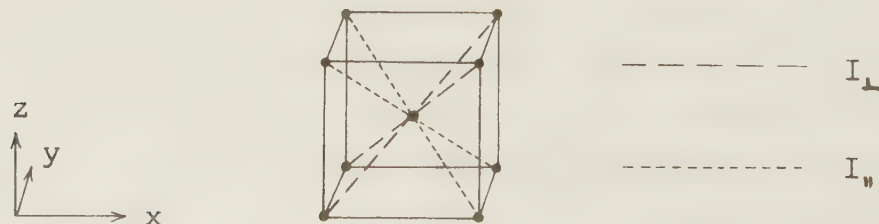
und

$$(3.3.2b) \quad g_{\perp}(\lambda) \approx 2\sqrt{2} \lambda^{-1/4} \quad \text{für } \lambda \gg 1$$

vereinfacht.

2. Kubisch-raumzentriertes Gitter

a. Benachbarte Spins in einer (101)-Netzebene seien über $I_{\parallel}$ gekoppelt, sonst sei die Wechselwirkung $I_{\perp}$:



Für $I_{\parallel} \rightarrow 0$ tritt eine Entkopplung in quadratische Gitter ein, desgleichen für $I_{\perp} \rightarrow 0$. Es ergeben sich nach (A2.19a,b) die Abhängigkeiten

$$(3.3.3a) \quad g_{\parallel}(\lambda) = \frac{8\pi^{1/2}}{3^{3/4}} (1+\lambda)^{1/4} \left\{ \ln\left(1+\frac{1}{\lambda}\right) + 2\sqrt{\frac{1}{\lambda}} \arctan\sqrt{\frac{1}{\lambda}} \right\}^{-1/2}$$

bzw.

$$(3.3.3b) \quad g_{\perp}(\lambda) = \frac{8\pi^{1/2}}{3^{3/4}} (1+\frac{1}{\lambda})^{1/4} \left\{ \ln\left(1+\lambda\right) + 2\sqrt{\lambda} \arctan\sqrt{\lambda} \right\}^{-1/2},$$

also ist die Relation

$$(3.3.3c) \quad g_{\parallel}(\lambda) = g_{\perp}\left(\frac{1}{\lambda}\right)$$

erfüllt. In der Übereinstimmung von $g_{\parallel}(\lambda)$ mit $g_{\perp}(1/\lambda)$ spiegelt sich wieder, daß die nächsten Nachbarn eines Spins in einer (101)-Netzebene, mit denen dieser über $I_{\parallel}$ gekoppelt ist, ihrerseits wieder sämtlich auf einer $(\bar{1}01)$ -Netzebene liegen, und diese beiden Netzebenen sind aus Symmetriegründen bei isotroper Wechselwirkung einander äquivalent.

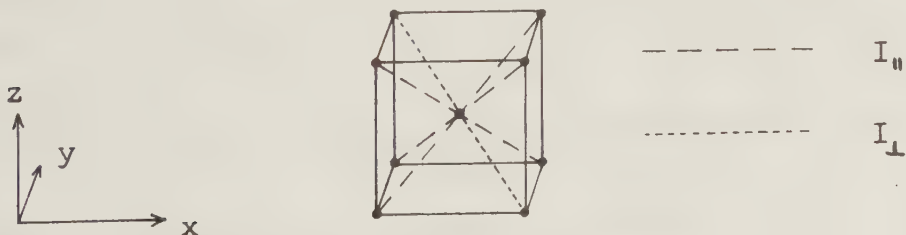
Als Näherungen für die beiden Fälle sehr starker Anisotropie erhalten wir aus (3.3.3)

$$(3.3.4a) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx \frac{8\pi^{1/2}}{3^{3/4}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\ln\frac{1}{\lambda} + 2}} \quad \text{für} \quad \lambda \ll 1$$

und

$$(3.3.4b) \quad g_{\perp}(\lambda) \approx \frac{8\pi^{1/2}}{3^{3/4}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\ln\lambda + 2}} \quad \text{für} \quad \lambda \gg 1.$$

b. Benachbarte Spins in einer $(1\bar{1}2)$ -Netzebene seien über $I_{\perp}$ gekoppelt, im übrigen herrsche die Wechselwirkung $I_{\parallel}$:



Für $I_{\parallel} \rightarrow 0$ tritt eine Entkopplung in parallele Spinketten ein, für $I_{\perp} \rightarrow 0$ bleibt eine dreidimensionale Struktur erhalten. Aus Anhang 2 (A2.25) entnehmen wir die Abhängigkeit der oberen Grenze der spontanen Magnetisierung von den

Wechselwirkungsgrößen zu

$$g_{\parallel}(\lambda) = \frac{2^{5/2} \pi^{1/2} (\sqrt{2}+1)^{1/2}}{3} \left\{ \ln \left(1 + \frac{4}{1+3\lambda} \right) + \frac{4}{\sqrt{1+3\lambda}} \arctan \frac{\sqrt{1+3\lambda}}{2} \right\}^{-1/2}$$

(3.3.5) bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

mit den Näherungen

$$(3.3.6a) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx \frac{2^{5/2} \pi^{1/2} (\sqrt{2}+1)^{1/2}}{3} \cdot \frac{1}{\sqrt{\ln 5 + 4 \arctan \frac{1}{2}}} \quad \text{für } \lambda \ll 1$$

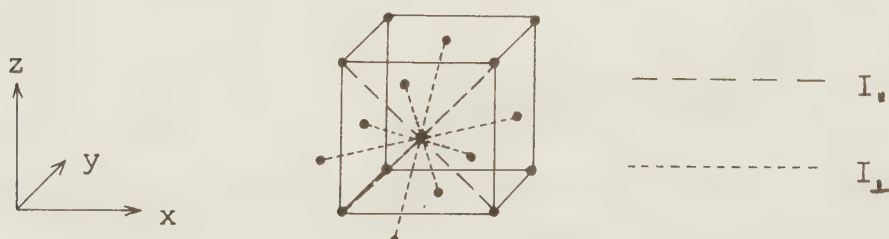
und

$$(3.3.6b) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx \frac{4(\sqrt{2}+1)^{1/2}}{3^{3/4}} \lambda^{-1/4} \quad \text{für } \lambda \gg 1$$

für die Fälle extremer Anisotropie.

3. Kubisch-flächenzentriertes Gitter

a. Zwischen benachbarten Spins in einer (010)-Netzebene bestehe die Wechselwirkung $I_{\parallel}$, sonst sei die Kopplung $I_{\perp}$:



Für $I_{\perp} \rightarrow 0$ tritt also eine Entkopplung in quadratische Gitter ein, während für $I_{\parallel} \rightarrow 0$ eine dreidimensionale Struktur erhalten bleibt. Für die Abhängigkeit der Schranke für ζ von dem Anisotropieparameter λ erhalten wir in (A2.30)

$$g_{\parallel}(\lambda) = 2^{3/4} \pi^{1/2} (1+\lambda)^{1/2} \left\{ \ln \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2\lambda} \right) + 2\sqrt{\frac{1+\lambda}{2\lambda}} \arctan \sqrt{\frac{2\lambda}{1+\lambda}} \right\}^{-1/2}$$

(3.3.7) bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

mit den Näherungen

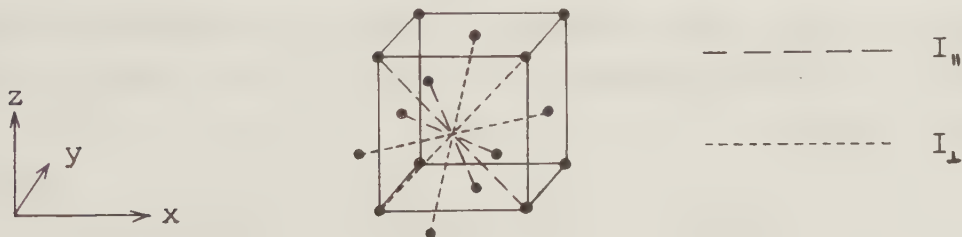
$$(3.3.8a) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx 2^{7/4} \pi^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\ln \frac{1}{2\lambda} + 2}} \quad \text{für} \quad \lambda \ll 1$$

sowie

$$(3.3.8b) \quad g_{\perp}(\lambda) \approx 2^{7/4} \pi^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\ln \frac{3}{2} + \sqrt{2} \arctan \sqrt{2}}} \quad \text{für} \quad \lambda \gg 1$$

bei sehr großen und sehr kleinen Werten von λ .

b. Benachbarte Spins in einer (111)-Netzebene seien über $I_{\parallel}$ gekoppelt, während die Wechselwirkung sonst $I_{\perp}$ betragen möge:



Für $I_{\perp} \rightarrow 0$ tritt wie unter a. ebenfalls eine Entkopplung zu zweidimensionalen Modellen ein, bei denen es sich in diesem Beispiel aber um Dreiecksgitter mit der höheren Koordinationszahl 6 handelt. Jetzt finden wir in (A2.36) die Resultate

$$g_{\parallel}(\lambda) = 2^{5/4} \pi^{1/2} (1+\sqrt{2})^{1/2} 3^{-3/4} (3+\lambda)^{1/2} \left\{ \ln \left(\frac{5}{4} + \frac{3}{4\lambda} \right) + \sqrt{\frac{3+\lambda}{\lambda}} \arctan \left(2\sqrt{\frac{\lambda}{3+\lambda}} \right) \right\}^{-1/2}$$

(3.3.9) bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

mit den Näherungen

$$(3.3.10a) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx 2^{5/4} \pi^{1/2} (1+\sqrt{2})^{1/2} 3^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\ln \frac{3}{4\lambda} + 2}} \quad \text{für} \quad \lambda \ll 1$$

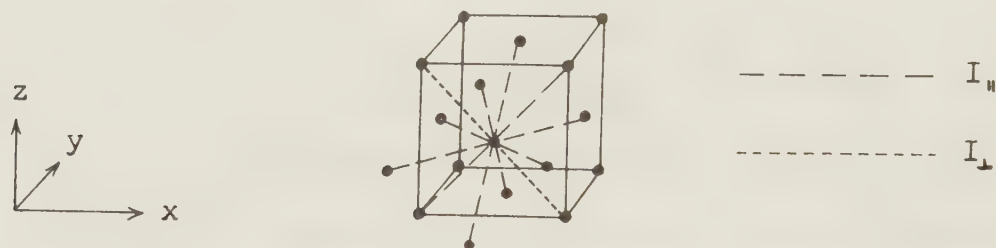
und

$$(3.3.10b) \quad g_{\perp}(\lambda) \approx 2^{5/4} \pi^{1/2} (1+\sqrt{2})^{1/2} 3^{-3/4} \frac{1}{\sqrt{\ln \frac{3}{4} + \arctan 2}} \quad \text{für} \quad \lambda \gg 1,$$

deren funktionale Abhängigkeit von λ sich von den Ergebnissen

in a. nicht wesentlich unterscheidet.

c. In diesem letzten Beispiel soll die Kopplung zwischen benachbarten Spins in einer (101)-Netzebene den Wert $I_{\perp}$ besitzen, während die Wechselwirkung sonst $I_{\parallel}$ sein möge:



Für $I_{\parallel} \rightarrow 0$ tritt eine Entkopplung zu Spinketten ein, für $I_{\perp} \rightarrow 0$ bleibt eine dreidimensionale Struktur erhalten. Die Ergebnisse für die Abhängigkeit der spontanen Magnetisierung von den Wechselwirkungen $I_{\perp}$ und $I_{\parallel}$ erhalten wir in (A2.43) zu

$$g_{\parallel}(\lambda) = 4\sqrt{2\pi} \left\{ \ln \left(1 + \frac{2}{2+\lambda} \right) + 2\sqrt{\frac{2}{1+\lambda}} \arctan \sqrt{\frac{1+\lambda}{2}} \right\}^{-1/2}$$

(3.3.11) bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

sowie

$$(3.3.12a) \quad g_{\parallel}(\lambda) \approx 4\sqrt{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\ln 2 + 2\sqrt{2} \arctan \frac{1}{\sqrt{2}}}} \quad \text{für } \lambda \ll 1$$

und

$$(3.3.12b) \quad g_{\perp}(\lambda) \approx 2^{1/4} \lambda^{-1/4} \quad \text{für } \lambda \gg 1$$

in den Fällen sehr starker Anisotropie.

Die Abhängigkeit der oberen Schranke für die spontane Magnetisierung σ von dem Anisotropieparameter λ ist für das kubisch-einfache Gitter in der Abbildung 1 (Seite 22), für die Beispiele aus dem kubisch-raumzentrierten und dem kubisch-flächenzentrierten Gitter in den Abbildungen 2 und 3 auf den Seiten 23 und 24 wiedergegeben, und zwar ist für $\lambda \leq 1$ $g_{\parallel}(\lambda)$ und für $\lambda \gg 1$ $g_{\perp}(\lambda)$ aufgetragen, wobei die Funktionen $g_{\parallel}(\lambda)$ und

$g_{\perp}(\lambda)$ auf ihre Werte im dreidimensionalen isotropen Modell normiert sind.

Um das unterschiedliche Verhalten unseres Modells für $\lambda > 1$ und $\lambda < 1$ zu deuten, sollten bei einem festen Verhältnis $\lambda_0 = I_{\perp}/I_{\parallel}$ die Funktionswerte $g_{\parallel}(\lambda_0)$ und $g_{\perp}(1/\lambda_0)$ miteinander verglichen werden, denn in beiden Fällen werden Ferromagnete behandelt, in denen jeweils die eine der beiden Wechselwirkungen auf den gleichen Bruchteil der anderen reduziert ist.

Gehen wir vom isotropen Modell mit $\lambda = 1$ aus, können wir in allen Kurven mit wachsender Anisotropie eine Abnahme der Funktionswerte feststellen. In allen Grenzfällen, in denen eine Entkopplung zu Flächengittern oder linearen Ketten auftritt, verschwindet die obere Schranke der spontanen Magnetisierung $\mathfrak{G}$ und damit $\mathfrak{G}$ selbst in Übereinstimmung mit dem Theorem von MERMIN und WAGNER, wobei dieses Verschwinden allerdings wegen der unterschiedlichen funktionalen Abhängigkeit vom Anisotropieparameter λ beim Übergang zum Flächengitter signifikant langsamer als bei der Entwicklung zu Spinketten erfolgt. Diejenigen Beispiele, in denen beim Abschalten einer der beiden Austauschwechselwirkungen eine dreidimensionale Struktur erhalten bleibt, sind in den Abbildungen daran zu erkennen, daß die Funktionen $g_{\parallel}(\lambda)$ und $g_{\perp}(\lambda)$ für $\lambda \rightarrow 0$ bzw. $\lambda \rightarrow \infty$ asymptotisch gegen einen Grenzwert ungleich Null streben, der schon nahezu erreicht ist, wenn der Wert der schwachen Kopplung nur noch ein Prozent der stärkeren Wechselwirkung beträgt.

Vergleicht man in Abbildung 3 die beiden Kurven, in denen ein Verschwinden von $I_{\perp}$ einen Übergang zu Flächengittern bedeutet, so läßt sich kein wesentlicher Einfluß der Koordinationszahlen der zweidimensionalen Modelle erkennen. Zwar erfolgt der Abfall der Schranke der spontanen Magnetisierung bei der Entwicklung zu einem Dreiecksgitter nicht so schnell wie beim Übergang zu einem quadratischen Gitter mit der niedrigeren Koordinationszahl, aber die Folgerung, daß bei einer größeren Koordinationszahl die Fernordnung nicht so schnell zusammenbricht, sollte schon allein deshalb nicht gezogen werden, weil zu der Bestimmung der Schranke von $\mathfrak{G}$ unterschiedliche Teilbereiche der Brillouin-Zone herangezogen wurden.

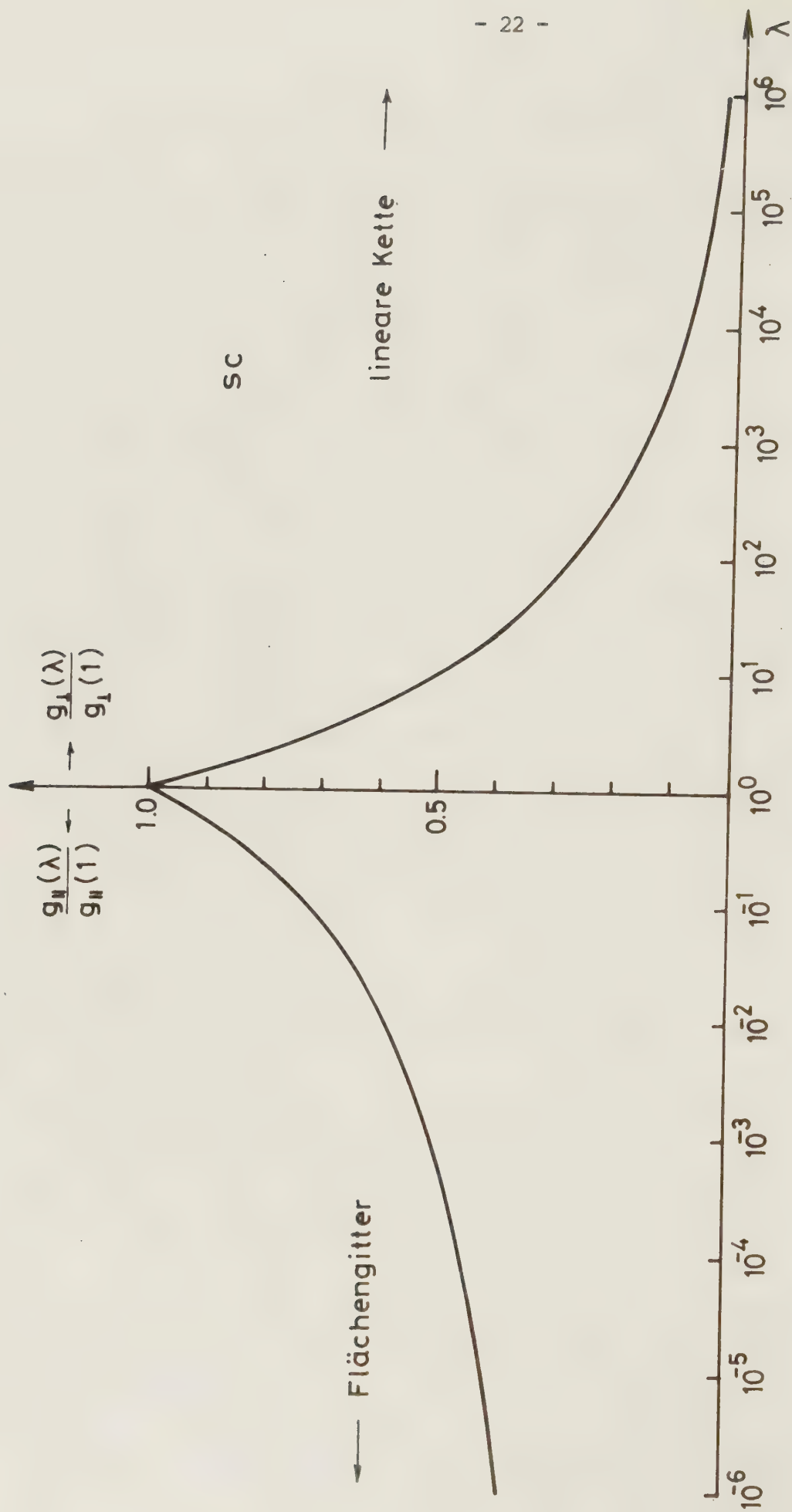


Abb. 1

Die Abhängigkeit der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung von dem Verhältnis $\lambda = I_{\parallel}/I_{\perp}$ der interplanaren zur intraplanaren Kopplung im kubisch-einfachen (sc) Gitter.

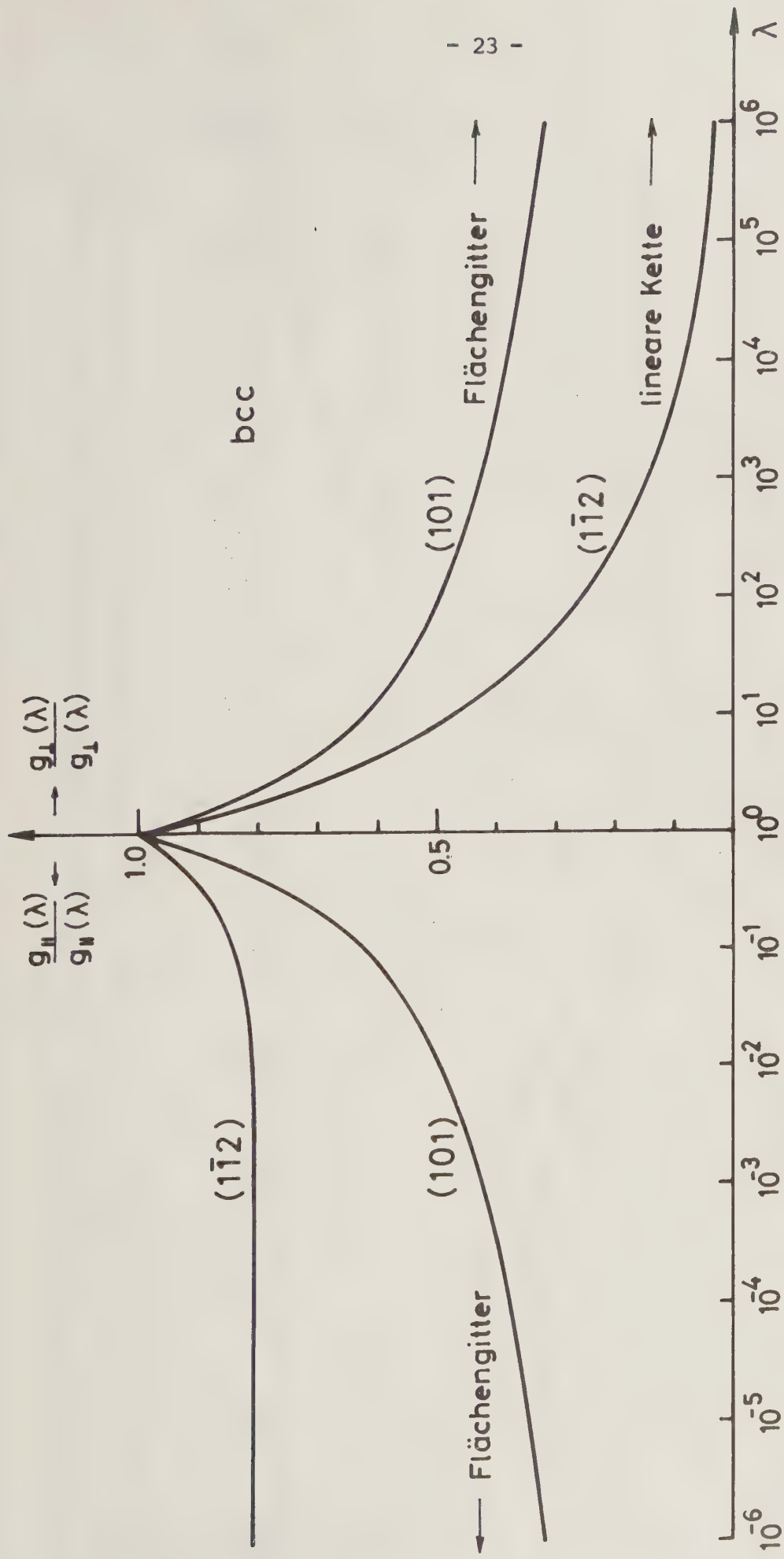


Abb. 2.

Die Abhängigkeit der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung vom Verhältnis $\lambda = I_s/I_e$ der Austauschwechselwirkungen I_s und I_e im kubisch-raumzentrierten (bcc) Gitter. Die Netzebenen kennzeichnen die Lage der Flächengitter und der Spinketten nach der Entkopplung.

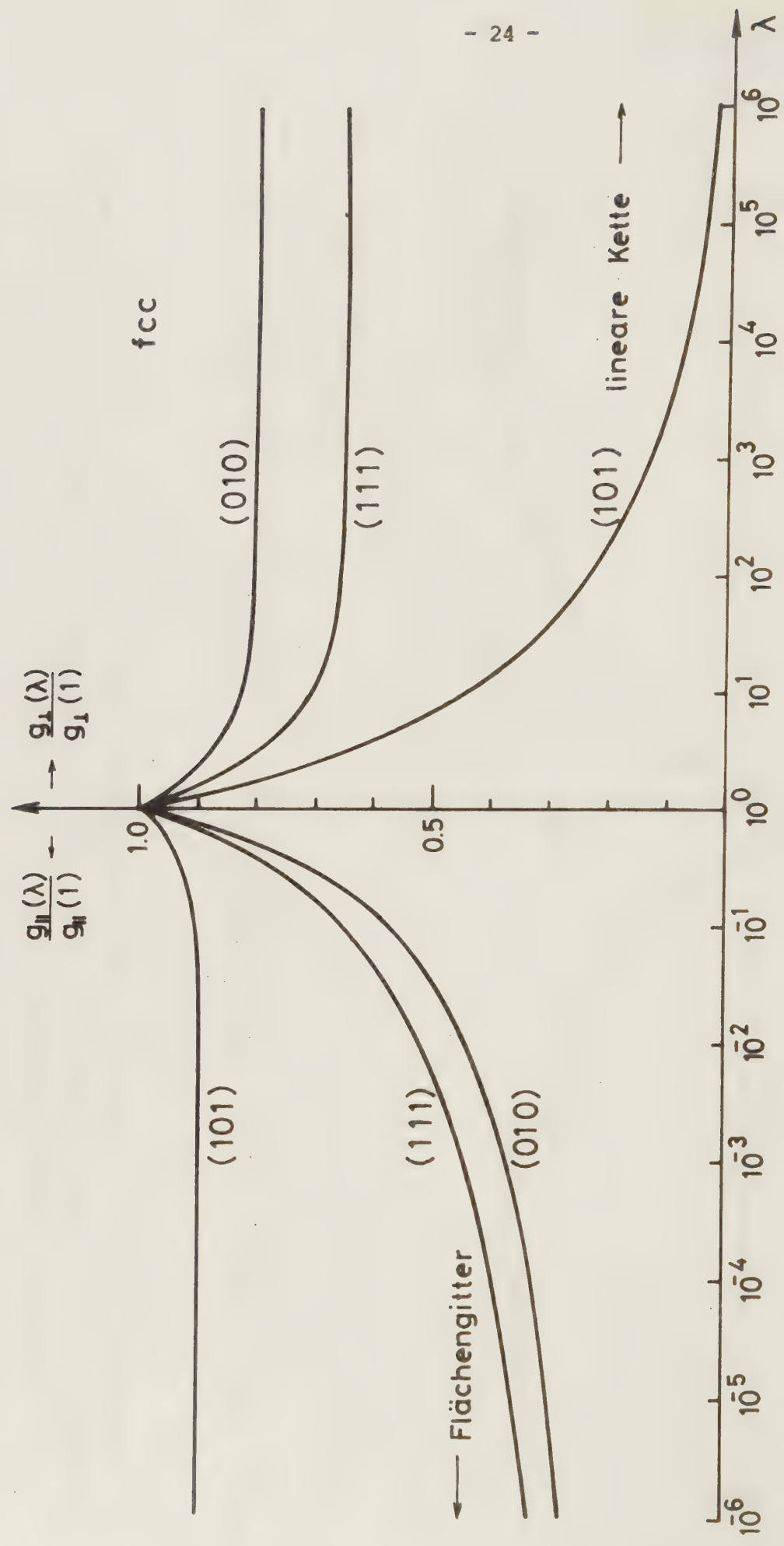


Abb. 3

Die Abhängigkeit der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung vom Verhältnis $\lambda = I_{\Delta}/I_{\square}$ der Austauschwechselwirkungen I_{Δ} und $I_{\square}$ im kubisch-flächenzentrierten (fcc) Gitter. Die Netzebenen kennzeichnen die Lage der Flächengitter und der Spinketten nach der Entkopplung.

3.4. Vergleich der Resultate

Um die Ergebnisse für die betrachteten Beispiele in den drei kubischen Raumgittern besser vergleichen zu können, sind in den Abbildungen 4 und 5 (Seite 26-27) von den Kurven für die Anisotropieabhängigkeit der spontanen Magnetisierung in den Abb. 1 bis 3 diejenigen Anteile nochmals zusammengefaßt, die Situationen beschreiben, in denen beim Verschwinden einer der Größen $I_{||}$ und $I_{\perp}$ eine Entkopplung zu zweidimensionalen Ferromagneten bzw. Spinketten eintritt. In Abb. 4 wurde dabei lediglich die Kurve für die (111)-Netzebenen-Struktur des kubisch-flächenzentrierten Gitters nicht berücksichtigt, da diese nur sehr geringfügig von der angegebenen Kurve für das Beispiel in dem kubisch-raumzentrierten Gitter abweicht.

Aus beiden Darstellungen entnehmen wir, daß die Abhängigkeit der oberen Schranke von dem Anisotropieparameter in erster Linie dadurch bestimmt wird, ob bei Abnahme einer der beiden Wechselwirkungen ein Übergang zu einem quasi-ein- oder einem quasi-zweidimensionalen Ferromagneten erfolgt, wohingegen ein Einfluß der Struktur und der verschiedenen Koordinationszahlen kaum zu bemerken ist, wie besonders die Beispiele für die Entwicklung zu schwach gekoppelten Spinketten in Abb. 5 zeigen.

Damit unterscheiden sich unsere Resultate von Ergebnissen bei Anwendung der Weiß'schen Molekularfeldtheorie (MFA), in der bekanntlich Größen wie Magnetisierung, Curie-Temperatur und Suszeptibilität wesentlich von der Anzahl der Wechselwirkungspartner eines Spins abhängen. Dagegen übt die Dimension des Modells in dieser Theorie keinen Einfluß aus, was unter anderem in der Vorhersage einer spontanen Magnetisierung in Flächengittern und linearen Spinketten zum Ausdruck kommt. In einer andersartigen Näherung, der "random phase approximation" (RPA) in der Theorie der Greenschen Funktionen nach BOGOLIUBOV und TYABLIKOV, wirkt sich hingegen die Dimension der Struktur sehr stark aus. Ihr Einfluß geht aber letztlich auch wieder auf Integrale zurück, deren wesentliche Eigenschaften denen des Integrals in (3.2.19) sehr stark ähneln.

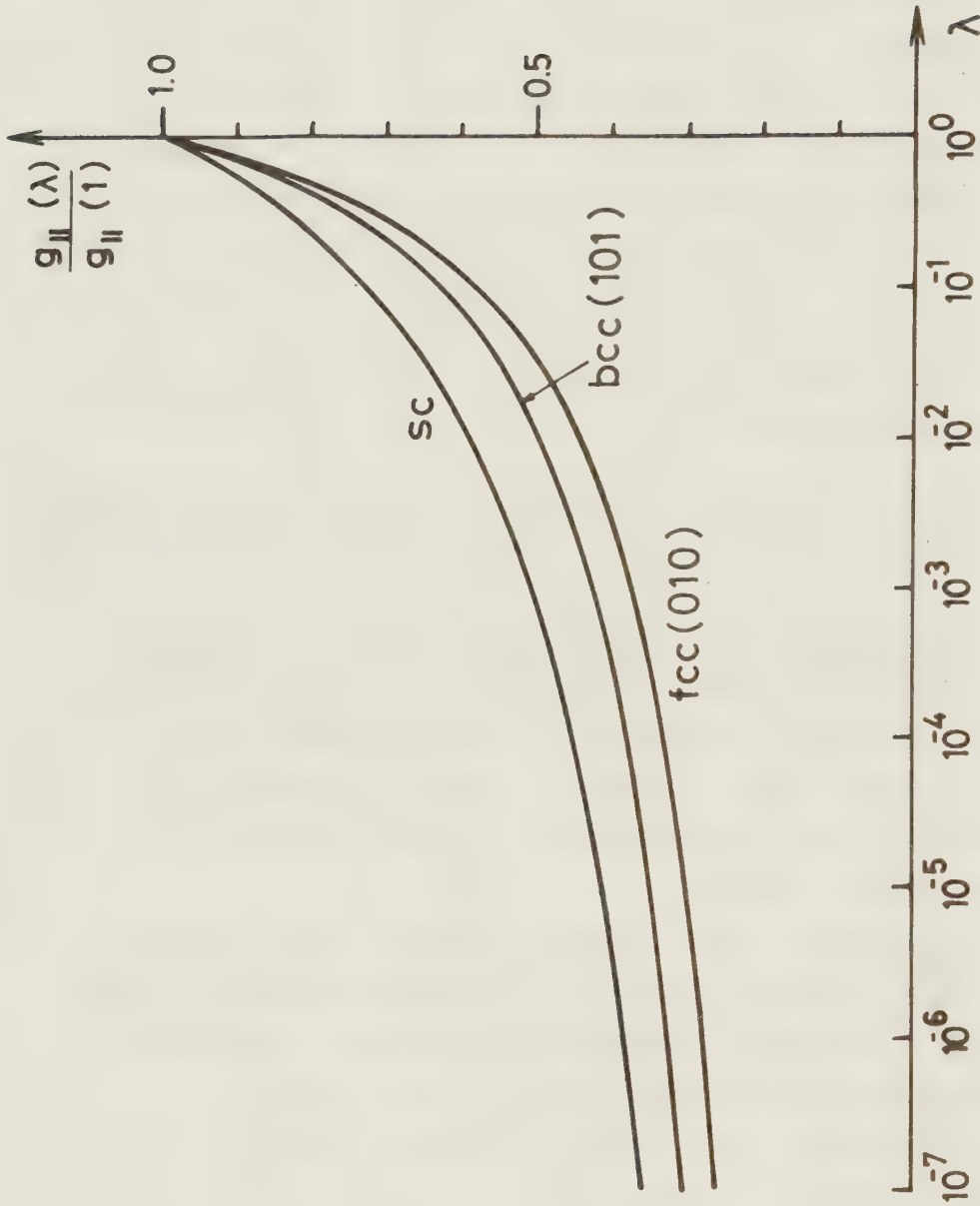


Abb. 4

Vergleich der oberen Schranken der spontanen Magnetisierung in den drei kubischen Raumgittern für diejenigen Beispiele, in denen ein Übergang vom drei- zum zweidimensionalen Gitter erfolgt.

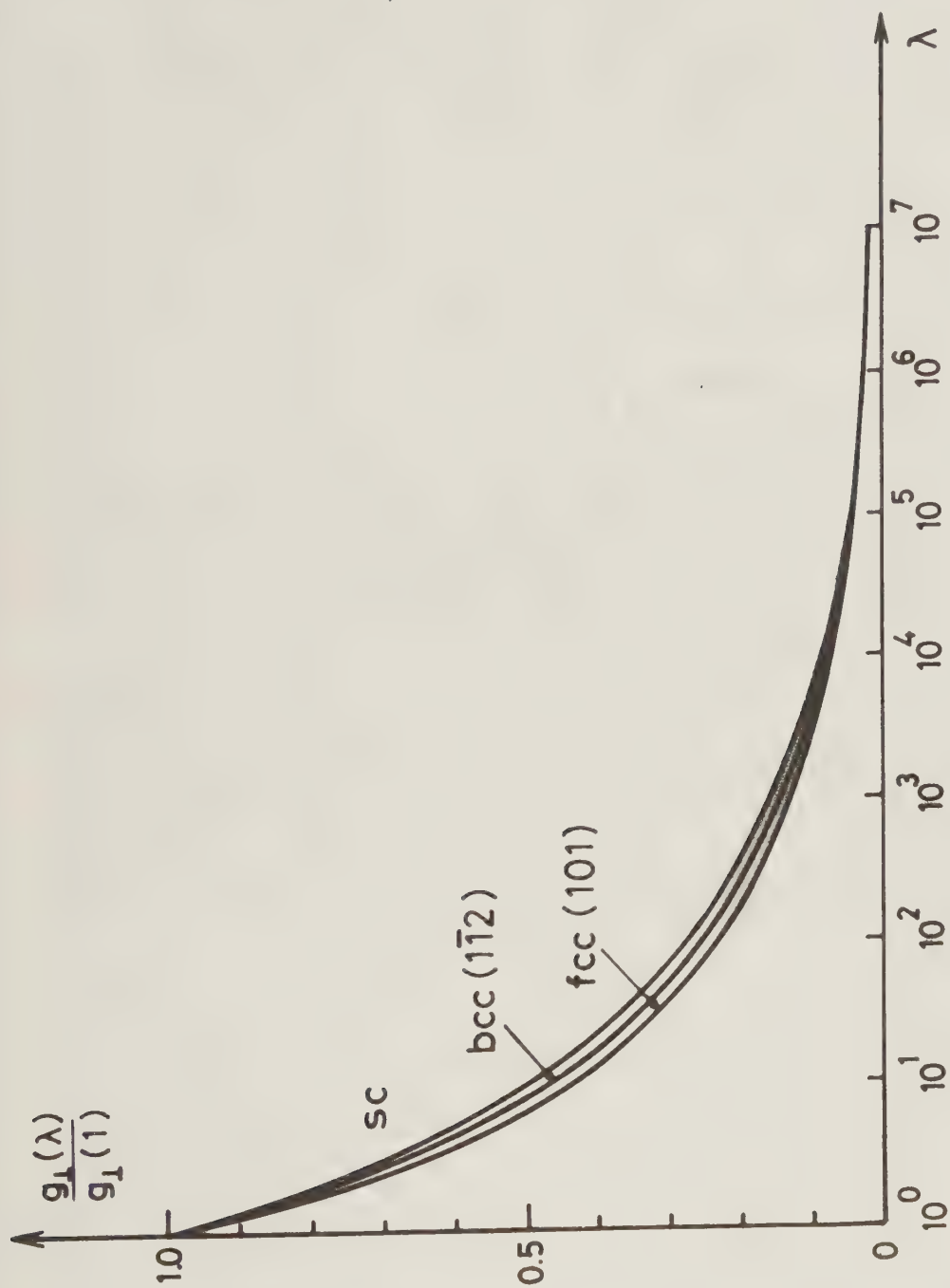


Abb. 5

vergleich der oberen Schranken der spontanen Magnetisierung in den drei kubischen Raumgittern für diejenigen Beispiele, in denen ein Übergang vom dreidimensionalen Gitter zur linearen Kette erfolgt.

Am deutlichsten tritt der Einfluß der Dimension in den Beispielen beim Verschwinden der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung bei der Entartung zu den niederdimensionalen Modellen hervor, das in allen Strukturen in jeweils gleicher funktionalen Abhängigkeit vom Anisotropieparameter λ erfolgt, denn es gilt immer

$$(3.4.1) \quad \sigma \leq \text{const.} \cdot T^{-1/2} \cdot \lambda^{-1/4}$$

beim Übergang zu Spinketten ($\lambda \rightarrow \infty$) und

$$(3.4.2) \quad \sigma \leq \text{const.} \cdot T^{-1/2} \cdot \left[\ln \frac{1}{\lambda} \right]^{-1/2}$$

bei der Entkopplung zu Flächengittern ($\lambda \rightarrow 0$). Folglich genügt im Gegensatz zum quasi-eindimensionalen Modell bereits eine sehr geringe Kopplung zwischen Flächengittern, um ein dreidimensionales Verhalten zu erzeugen.

Bislang haben wir nur eine obere Schranke für die spontane Magnetisierung untersucht. In dem nun folgenden Kapitel wollen wir durch eine Behandlung des Modells (2.2) im Rahmen der Theorie der Greenschen Funktionen klären, ob auch die spontane Magnetisierung selbst eine entsprechende Abhängigkeit von den Wechselwirkungskonstanten besitzt.

4. Die Behandlung des Modells (2.2) in einer Näherung im Rahmen der Theorie der Greenschen Funktionen

Da wir Auskunft über thermodynamische Größen und statistische Mittelwerte unseres Modells erlangen wollen, die über die Ergebnisse des vorhergehenden Abschnitts hinausgeht, geben wir in diesem Kapitel ein Näherungsverfahren zur Behandlung des Systems (2.2) an, und zwar werden wir die Methode der zweizeitigen Greenschen Funktionen verwenden, die von ZUBAREV (1961) entwickelt wurde, und die sich als wichtiges Hilfsmittel bei der Untersuchung von Heisenberg-Magneten erwiesen hat. So behandelten BOGOLIUBOV und TYABLIKOV (1959) einen Spin-1/2-Ferromagneten in einer üblicherweise random phase approximation (RPA) genannten Näherung, die später TAHIR-KHELI und TER HAAR (1962) auf Spinsysteme mit beliebiger Quantenzahl erweiterten. Überlegungen, die die Eigenschaften eines Ferromagneten für sehr tiefe Temperaturen einerseits und unterhalb des Phasenumwandlungspunktes andererseits betreffen, führten CALLEN (1963) auf eine weitere wichtige Näherung. Diese Näherungsmethoden vermeiden alle einige Nachteile, die die Ergebnisse der Molekularfeldtheorie (MFA) nach WEISS (1907) aufweisen; doch besitzt jene hingegen den Vorteil, aus einem Variationsverfahren für die freie Energie ableitbar zu sein. In der MFA wird bekanntlich die Phasenumwandlung eines Heisenberg-Ferromagneten nur sehr vereinfacht beschrieben, und einige wichtige Eigenschaften des Modells bleiben unberücksichtigt.

So weisen ein- und zweidimensionale ferromagnetische Systeme in der MFA eine spontane Magnetisierung auf, die aber nach MERMIN und WAGNER (1966) nicht auftreten darf, wie es auch noch einmal in den Ergebnissen des vorherigen Kapitels zum Ausdruck kam. Dazu finden Effekte der Nahordnung, die sicherlich in der Umgebung des Phasenumwandlungspunktes eine Rolle spielen, in der MFA keine Beachtung. Außerdem bleiben kollektive Aspekte unberücksichtigt, da das System approximativ durch einen Einteilchenoperator beschrieben wird. Diese können dagegen bei den Untersuchungen mittels der Methode der Greenschen Funktionen über den Einfluß des Spektrums der Elementaranregungen auf dem magneti-

schen Grundzustand hervortreten. So führt die RPA zum Beispiel auf ein Tieftemperaturverhalten der spontanen Magnetisierung, das mit dem Ergebnis der Spinwellentheorie von BLOCH (1930) übereinstimmt, in der die Abnahme der spontanen Magnetisierung durch die thermische Anregung von Spinwellen erklärt wird.

Bei der Untersuchung unseres Modells soll die Näherungsmethode von ROTH (1968) Anwendung finden, die es MUBAYI und LANGE (1969) ermöglichte, bei dem zweidimensionalen Modell eines isotropen Heisenberg-Ferromagneten einen Übergang von einer paramagnetischen zu einer Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung zu beschreiben. Daher wollen wir zunächst eine kurze Übersicht über die Theorie der Greenschen Funktionen geben, die diejenigen Überlegungen und Beziehungen enthält, die für die Durchführung der Näherung notwendig sind. An sie wird sich noch eine Beschreibung der Näherungsmethode anschließen, bevor wir diese auf unser Modell anwenden.

4.1. Eine kurze Darstellung der Theorie der Greenschen Funktionen

Unser Ziel ist es, statistische Mittelwerte von Operatoren A und B der Form

$$(4.1.1) \quad \langle AB \rangle = \frac{1}{Z} \text{Spur} (e^{-\beta \mathcal{H}} AB) \quad , \quad Z = \text{Spur} (e^{-\beta \mathcal{H}})$$

zu untersuchen. Hierbei bedeuten $\mathcal{H}$ der Hamiltonoperator des Problems und β die reziproke Temperatur. Betrachten wir darüberhinaus die zeitliche Änderung der Operatoren A und B in der Heisenberg-Darstellung

$$(4.1.2) \quad A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} \quad , \quad B(t) = e^{i\mathcal{H}t} B e^{-i\mathcal{H}t} \quad ,$$

so werden wir auf die Korrelationsfunktionen

$$(4.1.3) \quad K_{AB}(t_1, t_2) = \langle A(t_1) B(t_2) \rangle \quad \text{und} \quad K_{BA}(t_1, t_2) = \langle B(t_2) A(t_1) \rangle$$

geführt, die für $t_1 = t_2 = 0$ wieder mit den statistischen Mittel-

werten identisch sind. Aus der elementaren Eigenschaft der Spur, daß die Operatoren zyklisch vertauscht werden dürfen, folgt unmittelbar, daß die Korrelationsfunktionen im statistischen Gleichgewicht lediglich von der Zeitdifferenz $t_1 - t_2$ abhängen:

$$\begin{aligned}
 K_{AB}(t_1, t_2) &= \frac{1}{Z} \text{Spur} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t_1} A(0) e^{-i\mathcal{H}t_1} e^{i\mathcal{H}t_2} B(0) e^{-i\mathcal{H}t_2} \right\} \\
 (4.1.4a) \quad &= \frac{1}{Z} \text{Spur} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}(t_1 - t_2)} A(0) e^{-i\mathcal{H}(t_1 - t_2)} B(0) \right\} \\
 &= \langle A(t_1 - t_2) B(0) \rangle = K_{AB}(t_1 - t_2, 0)
 \end{aligned}$$

Entsprechend erhält man

$$(4.1.4b) \quad K_{BA}(t_1, t_2) = \langle B(0) A(t_1 - t_2) \rangle = K_{BA}(t_1 - t_2, 0).$$

Daher genügt es also, die Korrelationsfunktionen $\langle A(t) B(0) \rangle$ und $\langle B(0) A(t) \rangle$ zu bestimmen. Aufgrund der Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$(4.1.5) \quad \frac{dA}{dt} = i [\mathcal{H}, A(t)]$$

für Operatoren in einem Maßsystem mit $\hbar=1$ erhält man als Differentialgleichungen für die Korrelationsfunktionen $K_{AB}(t)$ und $K_{BA}(t)$

$$\frac{d}{dt} \langle A(t) B(0) \rangle = i \langle [\mathcal{H}, A(t)] B(0) \rangle$$

(4.1.6) sowie

$$\frac{d}{dt} \langle B(0) A(t) \rangle = i \langle B(0) [\mathcal{H}, A(t)] \rangle.$$

Im allgemeinen stehen in den Gleichungen (4.1.6) auf der rechten Seite Korrelationsfunktionen, die mehr als zwei Operatoren enthalten. Für diese kann man in der gleichen Weise eine Differentialgleichung aufstellen, die dann wieder eine Korrela-

tionsfunktion für eine noch größere Anzahl von Operatoren enthält. So wird man im allgemeinen auf ein System unendlich vieler Differentialgleichungen 1. Ordnung der Gestalt

$$\frac{d}{dt} \langle A_n(t) B(0) \rangle = i \langle A_{n+1}(t) B(0) \rangle$$

(4.1.7) bzw.

$$\frac{d}{dt} \langle B(0) A_n(t) \rangle = i \langle B(0) A_{n+1}(t) \rangle$$

mit

$$A_{n+1}(t) = [H, A_n(t)] \quad , \quad A_0(t) = A(t)$$

geführt. Eine approximative Lösung erhält man durch die künstliche Beschränkung auf ein System endlich vieler Gleichungen, die sich dadurch erreichen läßt, daß man eine Abhängigkeit des Kommutators $A_{n+1}(t)$ von den Kommutatoren A_1 bis A_n und vom Operator A annimmt:

$$(4.1.8) \quad A_{n+1}(t) = f(A_n(t), \dots, A_1(t), A(t))$$

Da sich die Konsequenzen für das Verhalten von physikalischen Meßgrößen durch ein Abbrechen (4.1.8) in der Reihe der Korrelationen normalerweise nicht vorhersagen lassen, werden üblicherweise physikalische Argumente benutzt, um ein entsprechendes Vorgehen und die spezielle Form der Funktion f in (4.1.8) zu begründen. Ein Vergleich mit Meßergebnissen an Substanzen, die durch den Modelloperator beschrieben werden können, muß dann letzten Endes über die Güte einer Näherung der Form (4.1.8) Aufschluß geben.

Als Anfangsbedingung für die Lösung des Systems (4.1.7) ergibt sich wegen der Beziehung

$$(4.1.9) \quad \langle B(0) A(t) \rangle = \langle A(t-i\beta) B(0) \rangle,$$

die ebenso wie die Zeitabhängigkeit (4.1.4) aus der zyklischen Vertauschbarkeit von Operatoren unter der Spur folgt, der Zusammenhang

$$(4.1.10) \quad \langle [A(0), B(0)]_{\pm} \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle \pm \langle A(-i\beta)B(0) \rangle,$$

in dem $[A, B]_{\pm}$ den Kommutator (-) oder den Antikommutator (+) zwischen den Operatoren A und B bezeichnet. Aus mathematischen Gründen, die mit der Möglichkeit der analytischen Fortsetzbarkeit zusammenhängen, erweist es sich als zweckmäßig, von den Korrelationsfunktionen in geeigneter Weise zu Greenschen Funktionen überzugehen. Von diesen können ebenso wie in der Quantenfeldtheorie auch in der statistischen Mechanik verschiedene Typen betrachtet werden, von denen hier lediglich retardierte und avancierte Greensche Funktionen

$$G_{AB}^r(t_1, t_2) = \mathcal{J}(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_2)]_{\pm} \rangle$$

(4.1.11)

$$G_{AB}^a(t_1, t_2) = -\mathcal{J}(t_2 - t_1) \langle [A(t_1), B(t_2)]_{\pm} \rangle$$

in der von TYABLIKOV (1967) gewählten Form angegeben werden (Definitionen anderer Autoren unterscheiden sich von (4.1.11) lediglich durch einen konstanten Faktor). Dabei bezeichnet $\mathcal{J}(t)$ die Sprungfunktion

$$(4.1.12) \quad \mathcal{J}(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{für } t < 0 \end{cases}.$$

Die Wahl des Kommutators oder des Antikommutators in (4.1.11) legen Problemstellung und thermodynamische Größen nahe, die untersucht werden sollen. So wie die Korrelationsfunktionen (4.1.4) sind auch die Greenschen Funktionen lediglich von der Zeitdifferenz

$$(4.1.13) \quad G_{AB}^i(t_1, t_2) = G_{AB}^i(t_1 - t_2) \quad i=r,a$$

abhängig und besitzen Linearitätseigenschaft hinsichtlich der Abhängigkeit von den Operatoren A und B aufgrund der entsprechenden Eigenschaft bei der Spurbildung. Statt der Differentialgleichungen (4.1.7) für die Paarkorrelationen gilt es nun, das System der Gleichungen

$$(4.1.14) \quad \frac{d}{dt} G_{A_n B}^i(t) = \delta(t) \langle [A_n(t), B(0)]_{\pm} \rangle + i G_{A_{n+1} B}^i(t)$$

$$A_{n+1} = [X, A_n]$$

zu untersuchen, deren äußere Gestalt sich von (4.1.7) durch einen inhomogenen Term mit der δ -Funktion als Faktor unterscheidet. Diese δ -Funktion rührt von der Differentiation der Sprungfunktion $\mathcal{N}(t)$ her, wie aus deren Darstellung

$$(4.1.15) \quad \mathcal{N}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon t'} \delta(t')$$

ersichtlich ist. Dem Vorgehen beim Bestimmen von Näherungslösungen für die Korrelationsfunktionen entspricht hier ebenfalls ein Abbrechen der Kette von Gleichungen für die Greenschen Funktionen, das durch eine Beziehung

$$(4.1.16) \quad G_{A_{n+1} B}^i(t) = f(G_{A_n B}^i, \dots, G_{AB}^i)$$

erfolgt und auf approximative Lösungen von (4.1.14) führt. Es ist zweckmäßig, in dem System (4.1.14) eine Fouriertransformation bezüglich der Zeit vorzunehmen, weil dadurch die Lösung des Systems gekoppelter Differentialgleichungen auf die Lösung eines Gleichungssystems zurückgeführt wird. Bezeichnet man als Fouriertransformierte der Greenschen Funktion das Integral

$$(4.1.17a) \quad G_{AB}^i(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt G_{AB}^i(t) e^{iEt}$$

mit der Umkehrung

$$(4.1.17b) \quad G_{AB}^i(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_{AB}^i(E) e^{-iEt}$$

so nimmt (4.1.14) die Gestalt

$$(4.1.18) \quad E G_{A_n B}^i(E) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \langle [A_n(0), B(0)]_{\pm} \rangle - G_{A_{n+1} B}^i(E)$$

unter der Voraussetzung an, daß die Randbedingungen

$$(4.1.19) \quad \left| G_{AB}^i(t) e^{iEt} \right|_{t=-\infty}^{t=+\infty} = 0$$

erfüllt sind. Üblicherweise erfolgt die Formulierung dieser Beziehung in der Spektraldarstellung. Betrachten wir dazu zunächst die Fouriertransformation der zweizeitigen Korrelationsfunktion $K_{BA}(t_1 - t_2)$

$$(4.1.20a) \quad J_{AB}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 dt_2 K_{BA}(t_1 - t_2) e^{iE(t_1 - t_2)}$$

mit der Umkehrung

$$(4.1.20b) \quad K_{BA}(t_1 - t_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE J_{AB}(E) e^{-iE(t_1 - t_2)},$$

so gilt wegen (4.1.9)

$$(4.1.21a) \quad K_{AB}(t_1 - t_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE J_{AB}(E) e^{\beta E} e^{-iE(t_1 - t_2)}$$

mit der Umkehrung

$$(4.1.21b) \quad J_{AB}(E) = e^{-\beta E} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 dt_2 K_{AB}(t_1 - t_2) e^{iE(t_1 - t_2)}.$$

(4.1.20) und (4.1.21) stellen die Spektraldarstellungen der Korrelationsfunktionen (4.1.3) mittels der Spektralfunktion $J_{AB}(E)$ dar. Wegen des engen Zusammenhangs zwischen Korrelationen und Greenschen Funktionen lassen sich auch die letzteren durch die Spektralfunktion beschreiben, und man erhält auf diese Weise die Spektraldarstellung der Greenschen Funktionen. Zu diesem Zweck setzen wir die Spektraldarstellung der Korrelationsfunktion in die Fouriertransformierte

$$(4.1.22) \quad G_{AB}^+(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathcal{V}(t) \langle [A(t), B(0)]_+ \rangle e^{iEt}$$

der retardierten Greenschen Funktion ein und erhalten als Ergebnis

$$(4.1.23) \quad G_{AB}^+(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathcal{V}(t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_{AB}(\omega) (e^{\beta\omega} \pm 1) e^{i(E-\omega)t},$$

wobei das obere (untere) Vorzeichen im Integranden durch die Wahl des Antikommutators (Kommutators) in der Definition der Greenschen Funktion festgelegt ist. Setzt man die Greensche Funktion in die komplexe E-Ebene fort, so lassen sich unter

der Voraussetzung

$$(4.1.24) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |J_{AB}(\omega)(e^{\beta\omega} \pm 1)| < \infty,$$

die eine Forderung an die Fourierkomponenten der Korrelationsfunktionen darstellt, einige weitere Aussagen gewinnen. Infolge der Abschätzungen

$$(4.1.25) \quad |G_{AB}^+(\epsilon)| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |J_{AB}(\omega)(e^{\beta\omega} \pm 1)| \int_0^{\infty} dt |e^{i\epsilon t}|$$

und

$$\left| \frac{d^n}{d\epsilon^n} G_{AB}^+(\epsilon) \right| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |J_{AB}(\omega)(e^{\beta\omega} \pm 1)| \int_0^{\infty} dt |t^n e^{i\epsilon t}|$$

ist die Beschränktheit der Greenschen Funktion und aller ihrer Ableitungen in der Halbebene mit $\text{Im } E > 0$ sichergestellt. Somit ist $G_{AB}^r(E)$ für $\text{Im } E > 0$ als analytische Funktion definiert. Die Funktionswerte auf der reellen Achse lassen sich - falls sie überhaupt existieren - als Grenzwerte

$$(4.1.26) \quad G_{AB}^+(x) = \lim_{y \rightarrow 0} G_{AB}^+(x+iy)$$

definieren. Geht man deshalb in (4.1.23) von der reellen Variablen E zu der komplexen Größe $E+i\epsilon$ mit $\epsilon > 0$ über, so läßt sich die Integration über t mit dem Ergebnis

$$(4.1.27a) \quad G_{AB}^+(E+i\epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_{AB}(\omega)(e^{\beta\omega} \pm 1) \frac{1}{E-\omega+i\epsilon}, \quad \epsilon > 0$$

für die retardierte Greensche Funktion durchführen. Mit (4.1.27a) haben wir die Spektraldarstellung der retardierten Greenschen Funktion gefunden. Wenden wir die soeben durchgeführten Überlegungen für die retardierte Funktion entsprechend auf die avancierte Greensche Funktion an, so ergibt sich deren Spektraldarstellung

$$(4.1.27b) \quad G_{AB}^a(E-i\epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_{AB}(\omega)(e^{\beta\omega} \pm 1) \frac{1}{E-\omega-i\epsilon}, \quad \epsilon > 0,$$

wobei noch anzumerken ist, daß $G_{AB}^a(E)$ eine analytische Funktion in der Halbebene $\text{Im } E < 0$ ist.

Dadurch daß die Funktionswerte der retardierten Green-

schen Funktion auf der reellen Achse als Grenzwerte von der oberen Halbebene und die der avancierten Funktion als Grenzwerte von der unteren Halbebene her zu verstehen sind, wird die Erfüllung der Randbedingungen (4.1.19) sichergestellt. Um nun die Korrelationsfunktionen, an denen wir letztlich interessiert sind, mittels der Greenschen Funktionen bestimmen zu können, ist es notwendig, eine Beziehung zwischen diesen und der Spektralfunktion herzuleiten. Wird die Differenz

$$(4.1.28) \quad G_{AB}^+(E+i\epsilon) - G_{AB}^a(E-i\epsilon) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_{AB}(\omega) (e^{\beta\omega} \pm 1) \left(\frac{1}{E-\omega+i\epsilon} - \frac{1}{E-\omega-i\epsilon} \right), \quad \epsilon > 0$$

gebildet, so läßt sich aufgrund der formalen Identität von DIRAC (1958)

$$(4.1.29) \quad \frac{1}{E-\omega \pm i\epsilon} = H \frac{1}{E-\omega} \mp \pi \delta(E-\omega)$$

- H bedeutet, das Integral ist im Sinne des Hauptwertes zu bestimmen - die Gleichung

$$(4.1.30) \quad G_{AB}^+(E+i\epsilon) - G_{AB}^a(E-i\epsilon) = J_{AB}(E) (e^{\beta E} \pm 1)$$

gewinnen. Nun können wir wegen (4.1.20) die Beziehung

$$(4.1.31) \quad \langle B(0) A(t) \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{G_{AB}^+(E+i\epsilon) - G_{AB}^a(E-i\epsilon)}{e^{\beta E} \pm 1} e^{-iEt}$$

angeben, die es uns ermöglicht, über Greensche Funktionen die Korrelationen zu bestimmen.

4.2. Die Näherung

Nach der im letzten Abschnitt gegebenen Zusammenfassung der Theorie der Greenschen Funktionen wollen wir diese jetzt auf unser Modell (2.2) anwenden. Zunächst soll in dem System (4.1.14) linearer Differentialgleichungen die Gleichung für $n=0$ hergeleitet werden. Dazu müssen wir noch die Wahl der Operatoren A und B treffen, für die wir die Spinumklappoperatoren $s_i^+(t)$ bzw. $s_j^-(t)$ einsetzen wollen. Ferner werden wir uns in der Definition (4.1.11) der Greenschen Funktionen auf

die Kommutatoren festlegen. Unter Verwendung der Vertauschungsrelationen (2.8a) zwischen den Spinoperatoren erhält man die Differentialgleichungen

$$(4.2.1) \quad \frac{\partial}{\partial t} G_{ij}(t-t') = 2\delta(t-t')\langle s_i^z \rangle \delta_{ij} + iH'_{ij}(t-t') - iH_{ij}(t-t')$$

mit den Greenschen Funktionen

$$(4.2.2a) \quad G_{ij}(t-t') = \mathcal{N}(t-t') \langle [s_i^+(t), s_j^-(t')] \rangle$$

und

$$(4.2.2b) \quad H_{ij}(t-t') = \mathcal{N}(t-t') \left\{ -2I_{ij} \sum_{\delta_{ij}} \langle [s_i^z(t) s_{i+\delta_{ij}}^+(t), s_j^-(t')] \rangle - \langle [s_{i+\delta_{ij}}^z(t) s_i^+(t), s_j^-(t')] \rangle \right. \\ \left. - 2I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} \langle [s_i^z(t) s_{i+\delta_{\perp}}^+(t), s_j^-(t')] \rangle - \langle [s_{i+\delta_{\perp}}^z(t) s_i^+(t), s_j^-(t')] \rangle \right\}.$$

Wir werden bereits in der Gleichung (4.2.1) eine Entkopplung vornehmen, indem wir $H_{ij}(t-t')$ als Linearkombination der Funktionen $G_{ij}(t-t')$ ansetzen. Damit erhalten wir ein lineares inhomogenes Differentialgleichungssystem für die $G_{ij}(t-t')$. Eine Entkopplung in dieser Stufe setzt immer die Gültigkeit einer Operatorrelation

$$(4.2.3) \quad [s_n^+, \mathcal{H}] = \sum_e A_{ne} s_e^+$$

voraus, die in Wirklichkeit nicht besteht, wie wir an der Form von H_{ij} ablesen können; anderenfalls wäre unser Problem ja auch exakt lösbar. Aufgrund der Translationsinvarianz unseres Modells hängen die Koeffizienten A_{nl} lediglich von der Differenz der Gittervektoren $\vec{n} - \vec{l}$ ab. Mit der Näherung (4.2.3) setzen wir voraus, daß bei Temperaturen $T \neq 0$ die Anregungen des Systems durch Elementaranregungen auf der statistischen Gesamtheit ersetzt werden können. Die noch zu bestimmenden Anregungsenergien $-A_k$ werden im allgemeinen von der Temperatur abhängen und müssen für $T=0$ mit den Spinwellenenergien übereinstimmen. Dabei bedeuten die Größen

$$(4.2.4) \quad A_k = \sum_n e^{-ikn} A_{0n}$$

die Fourierkomponenten der Koeffizienten A_{nl} in (4.2.3). Daß

die Operatorengleichung (4.2.3) mit den noch zu bestimmenden Koeffizienten tatsächlich einen linearen Zusammenhang zwischen den Greenschen Funktionen H_{ij} und G_{ij} liefert, ist sofort aus deren Definition (4.1.11) und der Form ihrer Zeitableitung ersichtlich. Als Ergebnis erhalten wir mit (4.2.1)

$$(4.2.5) \quad H_{ij}(t-t') = \sum_e (A_{ie} + H' \delta_{ie}) G_{ej}(t-t').$$

Eine selbstkonsistente Bestimmung der Koeffizienten A_{nl} können wir nach ROTH (1968) nun in der Weise vornehmen, daß auf beiden Seiten der Gleichung (4.2.3) der Kommutator mit dem Spinumklappoperator s_m^- gebildet und anschließend über die statistische Gesamtheit gemittelt wird:

$$(4.2.6) \quad \langle [[s_n^+, \mathcal{H}], s_m^-] \rangle = \sum_e A_{ne} \langle [s_e^+, s_m^-] \rangle$$

Eine Auswertung der Kommutatoren liefert

$$(4.2.7) \quad A_{ne} = - \frac{1}{\langle s_n^z \rangle} \left\{ I_{\parallel} \sum_{\delta_n} \delta_{n+\delta_n, e} (2 \langle s_n^z s_{\delta_n}^z \rangle + \langle s_e^- s_n^+ \rangle) + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} \delta_{n+\delta_{\perp}, e} (2 \langle s_n^z s_{\delta_{\perp}}^z \rangle + \langle s_e^- s_n^+ \rangle) \right\} \\ + \frac{\delta_{ne}}{\langle s_n^z \rangle} \left\{ I_{\parallel} \sum_{\delta_n} (2 \langle s_n^z s_{n+\delta_n}^z \rangle + \langle s_n^- s_{n+\delta_n}^+ \rangle) + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (2 \langle s_n^z s_{n+\delta_{\perp}}^z \rangle + \langle s_n^- s_{n+\delta_{\perp}}^+ \rangle) \right\} - H' \delta_{ne}$$

für die Koeffizienten in (4.2.3). Da wir uns in dem Modell auf eine Nächstnachbarwechselwirkung beschränkt haben, erhalten wir auch nur nichtverschwindende Größen A_{nl} für den Fall, daß die Gitterplätze $\vec{l}$ und $\vec{n}$ identisch oder benachbart sind. Aufgrund der Translationsvarianz des Hamiltonoperators sind die Erwartungswerte $\langle s_n^z \rangle$, $\langle s_n^z s_{n+\delta}^z \rangle$, $\langle s_n^- s_{n+\delta}^+ \rangle$ und $\langle s_n^+ s_{n+\delta}^- \rangle$ vom Gitterplatz $\vec{n}$ unabhängig, und wegen der Symmetrie des Gitters sind alle Korrelationsfunktionen für diejenigen benachbarten Spins äquivalent, zwischen denen dieselbe Kopplung besteht. Bezeichnen wir mit η und μ die longitudinalen bzw. transversalen Korrelationsfunktionen

$$(4.2.8a) \quad \eta_{\parallel, \perp} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{\parallel, \perp}}^z \rangle$$

$$(4.2.8b) \quad \mu_{\parallel, \perp} = \langle s_n^+ s_{n+\delta_{\parallel, \perp}}^- \rangle = \langle s_n^- s_{n+\delta_{\parallel, \perp}}^+ \rangle,$$

so vereinfacht sich (4.2.7) zu

$$(4.2.9a) \quad A_{nn} = \frac{z_n \bar{I}_n}{\langle s^z \rangle} (2\eta_n + \mu_n) + \frac{z_\perp \bar{I}_\perp}{\langle s^z \rangle} (2\eta_\perp + \mu_\perp) - H'$$

$$(4.2.9b) \quad A_{n,n+\delta_{n,\perp}} = - \frac{I_{n,\perp}}{\langle s^z \rangle} (2\eta_{n,\perp} + \mu_{n,\perp})$$

$$(4.2.9c) \quad A_{ne} = 0 \quad \vec{n} \neq \vec{e}, \quad \vec{n} \neq \vec{e} + \vec{\delta}_{n,\perp} ;$$

z_n und $z_\perp$ bezeichnen die Anzahl der Wechselwirkungspartner mit der Kopplung I_n bzw. $I_\perp$.

Wie wir bereits anmerkten, bestimmen die Fourierkomponenten (4.2.4) der Größen A_{nl} die Energien der Elementaranregungen auf der statistischen Gesamtheit bei $T \neq 0$. Mit der Näherung (4.2.3) erhalten wir über die Eigenwerte $E(\vec{k}) = E_0 - A_{\vec{k}}$ der Gleichung

$$(4.2.10) \quad \mathcal{H} s_k^+ |0\rangle = E(\vec{k}) s_k^+ |0\rangle$$

die Anregungsenergien

$$(4.2.11) \quad -A_{\vec{k}} = H' - \frac{2\eta_n + \mu_n}{\langle s^z \rangle} (J_n(0) - J_n(\vec{k})) - \frac{2\eta_\perp + \mu_\perp}{\langle s^z \rangle} (J_\perp(0) - J_\perp(\vec{k})),$$

die sich von den Spinwellenenergien

$$(4.2.12) \quad E_{\vec{k}}^{sw} = (J_n(0) - J_n(\vec{k})) + (J_\perp(0) - J_\perp(\vec{k}))$$

bei $H'=0$ gerade durch die Renormalisierungsfaktoren

$$(4.2.13) \quad R_{n,\perp} = - \frac{2\eta_{n,\perp} + \mu_{n,\perp}}{\langle s^z \rangle}$$

unterscheiden.

An der Abhängigkeit der Renormalisierungsfaktoren von der Magnetisierung und den Nächstnachbarkorrelationen erkennen wir, daß eine Näherung (4.2.3) mit der Forderung (4.2.6) nur dann sinnvoll ist, wenn beim Fehlen eines äußeren Magnetfeldes in den Phasen mit $\langle s^z \rangle = 0$ die longitudinale Korrelation $\eta_{n,\perp}$ dem Betrag nach halb so groß ist wie die transversale Korrelation $\mu_{n,\perp}$ und entgegengesetztes Vorzeichen besitzt,

weil sonst die Renormalisierungsfaktoren über alle Grenzen wüchsen, und die Energie einer Elementaranregung unendlich groß würde. Neben den paramagnetischen Phasen könnte es sich bei $\langle s^z \rangle = 0$ auch um eventuell in Flächengittern und linearen Ketten vorhandene geordnete Phasen ohne spontane Magnetisierung im Tieftemperaturbereich handeln. Daß dann auch in der paramagnetischen Phase eine gebrochene Symmetrie vorliegt, sollte nicht von vornherein allzusehr stören, denn auch in der zumindest in dreidimensionalen Modellen recht brauchbaren RPA weisen oberhalb der Curie-Temperatur longitudinale und transversale Korrelationen unterschiedliche Werte auf.

Den Unterschied in der Entkopplung der Greenschen Funktionen zu dieser Näherung wollen wir uns noch einmal vergegenwärtigen (für eine eingehende Behandlung des Heisenberg-Ferromagneten in der RPA siehe z.B. TYABLIKOV (1967)). Auch in der RPA erfolgt die Entkopplung des Gleichungssystems (4.1.14) schon in der niedrigsten Ordnung, wobei die Koeffizienten A_{n1} in (4.2.3) durch die Forderung festgelegt werden, daß in den Funktionen $H_{ij}(t-t')$ der Gleichungen (4.2.1) die Operatoren s_n^z durch ihre thermodynamischen Erwartungswerte ersetzt werden. Wir erhalten mit den Koeffizienten

$$(4.2.14) \quad A_{ne}^{RPA} = -2I_{||} \langle s^z \rangle \sum_{\delta_n} (\delta_{e,n+\delta_{||}} - \delta_{en}) - 2I_{\perp} \langle s^z \rangle \sum_{\delta_{\perp}} (\delta_{e,n+\delta_{\perp}} - \delta_{en}) - H' \delta_{en}$$

für die Anregungsenergien

$$(4.2.15) \quad -A_k^{RPA} = H' - 2\langle s^z \rangle ((J_{||}(0) - J_{||}(k)) + (J_{\perp}(0) - J_{\perp}(k)))$$

im Vergleich zu (4.2.11). Hier werden also die Spinwellenenergien mit der relativen Magnetisierung $-2\langle s^z \rangle$ renormalisiert, was zu einer anschaulichen Deutung dieser Näherung führt, daß es um so einfacher ist, einen Spin umzuklappen, je geringer die Magnetisierung ist, je mehr Spins also bereits umgeklappt sind.

An dieser Stelle sollten wir betonen, daß in der in dieser Arbeit benutzten Näherung keine physikalische Begründung der Entkopplung in dem Gleichungssystem (4.1.14) angegeben wird, sondern daß diese rein formaler Natur ist. Über die Güte der Näherung kann deshalb erst entschieden werden, wenn Ergebnisse

für die thermodynamischen Erwartungswerte physikalischer Größen vorliegen. Dabei sind wir uns bewußt, daß zumindest beim Übergang zum zweidimensionalen Modell diese Näherung einige Wünsche offenläßt, weil nämlich dann die longitudinale Nächstnachbarkorrelationsfunktion im Bereich tiefer Temperaturen ein unbefriedigendes Verhalten aufweist, wie bereits KENAN (1970) dargelegt hat.

Da zwischen den Nächstnachbarkorrelationen und der Magnetisierung ein Zusammenhang besteht, wollen wir aus dem Spektrum (4.2.11) die longitudinalen Korrelationen

$\eta_{n,l} = \langle s_n^z s_{n+l}^z \rangle$ eliminieren. Aus der Gleichung

$$(4.2.16) \quad \langle [X, s_n^+] s_n^- \rangle = - \sum_e A_{ne} \langle s^+ s^- \rangle$$

wird nach Auswertung des Kommutators und Ersetzen der A_{nl} nach (4.2.9) die Relation

$$(4.2.17) \quad \begin{aligned} & 2I_{||} \sum_{\delta_{||}} (\langle s_n^z s_{n+\delta_{||}}^+ s_n^- \rangle - \langle s_{n+\delta_{||}}^z s_n^+ s_n^- \rangle) + 2I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\langle s_n^z s_{n+\delta_{\perp}}^+ s_n^- \rangle - \langle s_{n+\delta_{\perp}}^z s_n^+ s_n^- \rangle) + H' \langle s_n^+ s_n^- \rangle \\ & = \left(- \frac{z_{||} I_{||}}{\langle s^z \rangle} (2\eta_{||} + \mu_{||}) - \frac{z_{\perp} I_{\perp}}{\langle s^z \rangle} (2\eta_{\perp} + \mu_{\perp}) + H' \right) \langle s_n^+ s_n^- \rangle + \frac{z_{||} I_{||}}{\langle s^z \rangle} \mu_{||} (2\eta_{||} + \mu_{||}) + \frac{z_{\perp} I_{\perp}}{\langle s^z \rangle} \mu_{\perp} (2\eta_{\perp} + \mu_{\perp}), \end{aligned}$$

und mittels der für die Spinquantenzahl $S=1/2$ und Operatoren am gleichen Gitterplatz gültigen Beziehungen

$$(4.2.18a) \quad s^- s^+ = \frac{1}{2} - s^z$$

und

$$(4.2.18b) \quad s^- s^z = s^- \left(\frac{1}{2} - s^- s^+ \right) = \frac{1}{2} s^- - (s^-)^2 s^+ = \frac{1}{2} s^-$$

sowie der in (4.2.8) eingeführten Bezeichnungen für die Nächstnachbarkorrelationen erhalten wir

$$(4.2.19) \quad \begin{aligned} & -I_{||} z_{||} (\mu_{||} + \langle s^z \rangle + 2\eta_{||}) - I_{\perp} z_{\perp} (\mu_{\perp} + \langle s^z \rangle + 2\eta_{\perp}) \\ & = -I_{||} z_{||} \frac{1}{\langle s^z \rangle} (2\eta_{||} + \mu_{||}) \left(\frac{1}{2} + \langle s^z \rangle - \mu_{||} \right) - I_{\perp} z_{\perp} \frac{1}{\langle s^z \rangle} (2\eta_{\perp} + \mu_{\perp}) \left(\frac{1}{2} + \langle s^z \rangle - \mu_{\perp} \right). \end{aligned}$$

Da diese Gleichung für alle Werte von $I_{||}$ und $I_{\perp}$ gelten soll, insbesondere auch für $I_{||}=0$ und für $I_{\perp}=0$, müssen die beiden

Bedingungen

$$(4.2.20a) \quad 2\eta_{||} + \mu_{||} = \frac{2 \langle s^z \rangle^2}{1 - 2\mu_{||}}$$

und

$$(4.2.20b) \quad 2\eta_{\perp} + \mu_{\perp} = \frac{2 \langle s^z \rangle^2}{1 - 2\mu_{\perp}}$$

gleichzeitig erfüllt sein, und $\eta_{||,\perp}$ läßt sich demzufolge aus den Gleichungen eliminieren.

Damit können wir nun über die Lösung von (4.2.1) ein Gleichungssystem zur Bestimmung der Magnetisierung und der transversalen Korrelationen $\mu = \langle s_n^- s_{n+d}^+ \rangle$ herleiten.

4.3. Das Gleichungssystem zur Bestimmung der Magnetisierung und der transversalen Korrelationsfunktionen

Wie wir bereits in der kurzen Darstellung der Theorie der Greenschen Funktionen ausführten, ist die Lösung des Differentialgleichungssystems (4.2.1) nach Durchführung der Fouriertransformation (4.1.17) bezüglich der Zeit der Lösung eines gewöhnlichen Gleichungssystems äquivalent. Führen wir außerdem noch die Fouriertransformation

$$(4.3.1a) \quad G(\vec{k}, E) = \sum_{n-m} e^{-ik(n-m)} G_{nm}(E)$$

hinsichtlich der Ortskoordinaten mit der Umkehrung

$$(4.3.1b) \quad G_{nm}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{ik(n-m)} G(\vec{k}, E)$$

durch, die uns die Translationsinvarianz des Hamiltonoperators ermöglicht, bleibt lediglich die einfache Gleichung

$$(4.3.2) \quad E G(\vec{k}, E) = i \sqrt{\frac{2}{\eta}} \langle s^z \rangle - H' G(\vec{k}, E) + H(\vec{k}, E)$$

für $G(k, E)$ übrig, weil in unserer Näherung der Zusammenhang

$$(4.3.3) \quad H(\vec{k}, E) = \sum_{n-m} e^{-ik(n-m)} H_{nm}(E) = (A_k + H') G(\vec{k}, E)$$

besteht. Damit erhalten wir für die Greensche Funktion die

Beziehung

$$(4.3.4) \quad G(\vec{k}, E) = i \sqrt{\frac{2}{\eta}} \langle s^z \rangle \frac{1}{E - A_k}$$

mit

$$(4.3.5) \quad A_k = -H' - E(\vec{k}), \quad E(\vec{k}) = -\frac{2\langle s^z \rangle}{1-2\mu_{\parallel}} (J_{\parallel}(0) - J_{\parallel}(\vec{k})) - \frac{2\langle s^z \rangle}{1-2\mu_{\perp}} (J_{\perp}(0) - J_{\perp}(\vec{k})).$$

Dabei wurde für A_k das bereits in (4.2.11) gewonnene Ergebnis benutzt und im Anregungsspektrum $E(\vec{k})$ die Renormalisierung durch Magnetisierung und transversale Korrelationen μ gemäß (4.2.20) ausgedrückt. Die Relation (4.1.31) gestattet uns, die transversalen Korrelationsfunktionen mit Hilfe der Greenschen Funktionen (4.3.4) zu bestimmen, und mittels der Dirac-Identität (4.1.29) erhalten wir in der Impulsdarstellung das Ergebnis

$$(4.3.6) \quad \langle s^- s^+ \rangle_k = \frac{2\langle s^z \rangle}{e^{\beta A_k} - 1},$$

und in der Ortsdarstellung infolge der Identität

$$(4.3.7) \quad \frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{2} \coth \frac{x}{2} - \frac{1}{2}$$

lautet das Resultat

$$(4.3.8) \quad \langle s_n^- s_m^+ \rangle = \langle s^z \rangle \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(n-m)} \coth\left(\frac{\beta}{2} A_k\right) - \langle s^z \rangle \delta_{nm}.$$

Setzen wir nun $\vec{n}=\vec{m}$ und führen die relative Magnetisierung

$$(4.3.9) \quad \bar{b} = -2\langle s^z \rangle$$

ein, so wird aus der Gleichung (4.3.8) unter Berücksichtigung von (4.2.18a)

$$(4.3.10) \quad \frac{1}{\bar{b}} = \frac{1}{N} \sum_k \coth \left[\frac{\beta}{2} (H' + E(\vec{k})) \right].$$

Da das Anregungsspektrum $E(\vec{k})$ auch von den Nächstnachbarkorrelationen $\mu_{\parallel}$ und $\mu_{\perp}$ abhängt, handelt es sich bei (4.3.10) nicht um eine Bestimmungsgleichung für die Magnetisierung allein. Analoge Gleichungen für $\mu_{\parallel}$ und $\mu_{\perp}$ können wir jedoch

aus (4.3.8) erhalten, wenn $\vec{n}$ und $\vec{m}$ benachbarte Gitterplätze sind:

$$(4.3.11a) \quad \frac{\mu_{\parallel}}{\sigma} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\delta_{\parallel}} \coth \left[\frac{\beta}{2} (H' + E(\vec{k})) \right]$$

$$(4.3.11b) \quad \frac{\mu_{\perp}}{\sigma} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\delta_{\perp}} \coth \left[\frac{\beta}{2} (H' + E(\vec{k})) \right]$$

Die Relationen (4.3.10) und (4.3.11) stellen ein System transzendenter Gleichungen für die Magnetisierung σ und die beiden transversalen Nächstnachbarkorrelationsfunktionen $\mu_{\parallel}$ und $\mu_{\perp}$ dar. Da jedoch diese Größen in dem Spektrum $E(\vec{k})$ (4.3.5) in der Kombination

$$(4.3.12a) \quad C_{\parallel} = - \frac{2\langle s^2 \rangle}{1-2\mu_{\parallel}} = \frac{\sigma}{1-2\mu_{\parallel}}$$

und

$$(4.3.12b) \quad C_{\perp} = - \frac{2\langle s^2 \rangle}{1-2\mu_{\perp}} = \frac{\sigma}{1-2\mu_{\perp}}$$

vorkommen, erscheint es zweckmäßig, ein Gleichungssystem für die Magnetisierung σ und die Renormalisierungsfaktoren $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ anzugeben. Eine Zusammenfassung von (4.3.10) mit (4.3.11a) bzw. (4.3.11b) liefert

$$(4.3.13a) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = \frac{2}{z_{\parallel}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} E_{\parallel}(\vec{k}) \coth \left[\frac{\beta}{2} (H' + 2C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(\vec{k}) + 2C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(\vec{k})) \right]$$

sowie

$$(4.3.13b) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{2}{z_{\perp}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} E_{\perp}(\vec{k}) \coth \left[\frac{\beta}{2} (H' + 2C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(\vec{k}) + 2C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(\vec{k})) \right],$$

wobei wir die Abkürzungen

$$(4.3.14a) \quad E_{\parallel}(\vec{k}) = \frac{1}{2I_{\parallel}} (J_{\parallel}(0) - J_{\parallel}(\vec{k}))$$

und

$$(4.3.14b) \quad E_{\perp}(\vec{k}) = \frac{1}{2I_{\perp}} (J_{\perp}(0) - J_{\perp}(\vec{k}))$$

einführten. Zusammen mit der in der neuen Notation geschriebenen Gleichung (4.3.10) für die Magnetisierung

$$(4.3.15) \quad \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \coth \left[\frac{\beta}{2} (H' + 2C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(\vec{k}) + 2C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(\vec{k})) \right]$$

bilden (4.3.13a,b) das gewünschte System. Haben wir zunächst aus (4.3.13) die Renormalisierungsfaktoren $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ als Funktionen der Temperatur, des äußeren Magnetfelds und der Kopplungskonstanten $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ bestimmt, so berechnen wir mit ihrer Hilfe über (4.3.15) die Magnetisierung $\mathcal{M}$, danach mittels (4.3.12) die transversalen und schließlich nach (4.2.20) die longitudinalen Nächstnachbarkorrelationen. Im allgemeinen können die Lösungen des Gleichungssystems nicht analytisch angegeben werden, sondern müssen numerisch bestimmt werden. Verschwindet allerdings das äußere Magnetfeld H' , so sehen wir sofort, daß das System zumindest die triviale Lösung $C_{\parallel}=0$, $C_{\perp}=0$ und $\mathcal{M}=0$ besitzt.

Auch an dieser Stelle wollen wir unsere Resultate wieder mit den Ergebnissen der RPA vergleichen. In dieser Näherung ergeben sich die Gleichungen

$$(4.3.16a) \quad \frac{1}{\mathcal{G}^{RPA}} = \frac{1}{N} \sum_k \omega_k \left[\frac{\beta}{2} (H' + E^{RPA}(k)) \right]$$

$$(4.3.16b) \quad \frac{\mu_{\parallel}^{RPA}}{\mathcal{G}^{RPA}} = \frac{1}{2N} \sum_k e^{ik\delta_{\parallel}} \omega_k \left[\frac{\beta}{2} (H' + E^{RPA}(k)) \right]$$

$$(4.3.16c) \quad \frac{\mu_{\perp}^{RPA}}{\mathcal{G}^{RPA}} = \frac{1}{2N} \sum_k e^{ik\delta_{\perp}} \omega_k \left[\frac{\beta}{2} (H' + E^{RPA}(k)) \right],$$

die sich von (4.3.10) und (4.3.11) gerade durch das Anregungsspektrum

$$(4.3.17) \quad E^{RPA}(k) = \mathcal{G} \left((J_{\parallel}(0) - J_{\parallel}(k)) + (J_{\perp}(0) - J_{\perp}(k)) \right)$$

unterscheiden. Außerdem können wir jetzt die Magnetisierung $\mathcal{M}$ aus der transzendenten Gleichung (4.3.16a) allein bestimmen und mit diesem Ergebnis dann $\mu_{\parallel}^{RPA}$ und $\mu_{\perp}^{RPA}$ aus (4.3.16b) sowie (4.3.16c) berechnen. Auch das System (4.3.16) muß im allgemeinen numerisch gelöst werden. Zusammen mit der numerischen Auswertung von (4.3.13a,b) und (4.3.15) stellen wir diese Aufgabe aber zunächst noch zurück, um Aussagen über Curie-Temperatur und Suszeptibilität unseres Modells zu gewinnen sowie in gewissen Bereichen die asymptotische Abhängigkeit der Magnetisierung, Nächstnachbarkorrelationsfunk-

tionen und Renormalisierungsfaktoren von der Temperatur und dem Anisotropiefaktor zu untersuchen.

4.4. Curie-Temperatur. Suszeptibilität und Nächstnachbar-korrelationen im paramagnetischen Temperaturbereich

Zunächst wenden wir uns der Bestimmung der Curie-Temperatur zu und wollen die Abhängigkeit der Suszeptibilität von der Temperatur und den Kopplungskonstanten kennenlernen, wobei uns von diesem Abschnitt an als Beispiel für unser anisotropes Modell immer ein kubisch-einfaches Gitter dienen soll, in dem ein Spin in einer (001)-Netzebene mit seinen nächsten Nachbarn in derselben Netzebene über $I_{\parallel}$ gekoppelt sei, während die Wechselwirkung mit den übrigen nächsten Nachbarn $I_{\perp}$ betragen möge. Damit müssen wir die Koordinationszahlen $z_{\parallel}=4$ sowie $z_{\perp}=2$ und die Ausdrücke

$$(4.4.1) \quad E_{\parallel}(\vec{k}) = 2 - \cos k_1 - \cos k_2, \quad E_{\perp}(\vec{k}) = 1 - \cos k_3$$

in die Anregungsspektren in den bislang abgeleiteten Beziehungen einsetzen.

Es ist notwendig, vorab einige Eigenschaften der Renormalisierungsfaktoren $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ (4.3.12) zu untersuchen. Aufgrund der Tatsache, daß sich für ein Spin-1/2-System der Wertebereich von relativer Magnetisierung und transversalen Korrelationsfunktionen mit

$$(4.4.2) \quad 0 \leq \sigma \leq 1, \quad 0 \leq |\mu_{\parallel, \perp}| \leq \frac{1}{2}$$

angeben läßt, können $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ keine negativen Werte annehmen:

$$(4.4.3) \quad C_{\parallel, \perp} \geq 0$$

Deshalb werden die Argumente der coth-Funktionen in den Gleichungen (4.3.13) und (4.3.15) ebenfalls nicht negativ. Wegen der Abschätzung

$$(4.4.4) \quad \coth x \geq \frac{1}{x}, \quad x > 0$$

gewinnt man aus (4.3.13a) und (4.3.13b) die beiden Ungleichungen

$$(4.4.5a) \quad \frac{1}{C_{||}} \geq \frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{||}(\vec{k})}{H' + 2C_{||}I_{||}E_{||}(\vec{k}) + 2C_{\perp}I_{\perp}E_{\perp}(\vec{k})}$$

$$(4.4.5b) \quad \frac{1}{C_{\perp}} \geq \frac{2}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\perp}(\vec{k})}{H' + 2C_{||}I_{||}E_{||}(\vec{k}) + 2C_{\perp}I_{\perp}E_{\perp}(\vec{k})},$$

aus denen man durch Multiplikation von (4.4.5a) mit $\beta \cdot 2C_{||}I_{||}$ und von (4.4.5b) mit $\beta \cdot C_{\perp}I_{\perp}$ und anschließender Addition zu der Beziehung

$$(4.4.5c) \quad \beta(2I_{||} + I_{\perp}) + H' \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{H' + 2C_{||}I_{||}E_{||}(\vec{k}) + 2C_{\perp}I_{\perp}E_{\perp}(\vec{k})} \geq 1$$

gelangt. Die beiden Ungleichungen (4.4.5c) und (4.4.5b) bilden den Ausgangspunkt für den Beweis der für Temperaturen $\beta^{-1} > 2I_{||} + I_{\perp}$ gültigen Behauptungen

$$(4.4.6a) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{||}} \neq 0$$

und

$$(4.4.6b) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} \neq 0,$$

der im Anhang 3 durchgeführt wird. Deshalb erfüllen in dem Temperaturbereich $\beta^{-1} > 2I_{||} + I_{\perp}$ nur die trivialen Lösungen das Gleichungssystem (4.3.13,15).

Nach diesen Vorbemerkungen über die Renormalisierungsfaktoren im Bereich hoher Temperaturen können wir zur Bestimmung der Curie-Temperatur und der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität übergehen. Dazu gehen wir von den beiden Ungleichungen (4.4.5a) und (4.4.5b) in der Form

$$(4.4.7a) \quad 1 - 2\mu_{||} \geq \frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{||}(\vec{k})}{\frac{H'}{C} + \frac{2I_{||}}{1-2\mu_{||}} E_{||}(\vec{k}) + \frac{2I_{\perp}}{1-2\mu_{\perp}} E_{\perp}(\vec{k})}$$

und

$$(4.4.7b) \quad 1 - 2\mu_{\perp} \geq \frac{2}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\perp}(\vec{k})}{\frac{H'}{C} + \frac{2I_{||}}{1-2\mu_{||}} E_{||}(\vec{k}) + \frac{2I_{\perp}}{1-2\mu_{\perp}} E_{\perp}(\vec{k})}$$

aus und fügen ihnen die aus (4.3.15) gewonnene Abschätzung

$$(4.4.7c) \quad 1 \geq \frac{2}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\frac{H'}{G} + \frac{2I_{||}}{1-2\mu_{||}} E_{||}(\vec{k}) + \frac{2I_{\perp}}{1-2\mu_{\perp}} E_{\perp}(\vec{k})}$$

hinzu. Alle drei Ungleichungen gehen im Grenzfall $H' \rightarrow 0$ für Temperaturen $\beta^{-1} > 2I_{||} + I_{\perp}$ in Gleichungen über. Denn die Abschätzung (4.4.4) ist das Resultat der Vernachlässigung der Terme 2. und höherer Ordnung in der Reihenentwicklung

$$\coth x = \frac{1}{x} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{2n}}{(2n)!} B_n x^{2n-1}, \quad |x| \leq \pi \quad B_n: \text{Bernoullische Zahlen,}$$

und das Argument der coth-Funktion in dem Gleichungssystem (4.3.13,15) verschwindet für $H'=0$, $C_{||}=0$ und $C_{\perp}=0$. Führen wir die reziproke Nullfeldsuszeptibilität χ^{-1} über

$$(4.4.8) \quad \chi^{-1} = \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{G}$$

ein, so erhalten wir durch Multiplikation von (4.4.7a) mit $\frac{2I_{||}}{1-2\mu_{||}}$ und von (4.4.7b) mit $\frac{I_{\perp}}{1-2\mu_{\perp}}$ und anschließender Addition beider Gleichungen die Beziehung

$$(4.4.9) \quad 2I_{||} + I_{\perp} = \frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta} \chi^{-1} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\chi^{-1} + \frac{2I_{||}}{1-2\mu_{||}} E_{||}(\vec{k}) + \frac{2I_{\perp}}{1-2\mu_{\perp}} E_{\perp}(\vec{k})}$$

im Falle des Verschwindens des äußeren Feldes. Mittels (4.4.7c) ergibt sich schließlich die Relation

$$(4.4.10) \quad \chi = \frac{1}{2} \frac{1}{\beta^{-1} - (2I_{||} + I_{\perp})}$$

für die Suszeptibilität. Diese weist also, wenn wir von hohen Temperaturen her kommen, eine Divergenz für

$$(4.4.11) \quad \beta_c^{-1} = 2I_{||} + I_{\perp}$$

auf. Diese Temperatur grenzt den Bereich nach unten ab, den wir in diesem Abschnitt betrachten wollen und für den die bisherigen Überlegungen auch nur Gültigkeit besitzen. Unsere Ergebnisse für Curie-Temperatur und Suszeptibilität stimmen mit den Resultaten der Weißschen Molekularfeldtheorie (MFA) überein (siehe z.B. SMART (1966)), und stellen daher sicherlich keine gute Näherung zumindest für das isotrope dreidimensionale

Modell im Vergleich zur RPA dar, in der sich die Curie-Temperatur $(\beta_c^{RPA})^{-1}$ über

$$(4.4.12) \quad \beta_c^{RPA} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{I_{||} E_{||}(\vec{k}) + I_{\perp} E_{\perp}(\vec{k})}$$

und die Nullfeldsuszeptibilität über

$$(4.4.13) \quad \beta = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\chi_{RPA}^{-1} + 2 I_{||} E_{||}(\vec{k}) + 2 I_{\perp} E_{\perp}(\vec{k})}$$

nur numerisch bestimmen lassen. In dieser Näherung gibt es bekanntlich keine von Null verschiedene Curie-Temperatur in den ein- und zweidimensionalen Modellen ($I_{||}=0$ sowie $I_{\perp}=0$), da dann das Integral in (4.4.12) divergiert. Für das dreidimensionale Modell mit anisotroper Kopplung liegt die Curie-Temperatur der MFA immer über derjenigen, die man in der RPA erhält (siehe z.B. LINES (1964)).

Die Abhängigkeit der reduzierten Curie-Temperatur von dem Verhältnis λ der beiden Austauschwechselwirkungen $I_{\perp}$ und $I_{||}$ in der RPA ist in der Abbildung 6 (Seite 51) wiedergegeben. Wir können feststellen, daß $(\beta_c^{RPA})^{-1}$ bei der Abnahme der Wechselwirkung zwischen Spinketten stärker als bei einer vergleichbaren Abnahme der Kopplung zwischen Spins in unterschiedlichen (001)-Netzebenen zurückgeht, also nur eine geringfügige Kopplung $I_{\perp}$ notwendig ist, um eine relativ hohe Curie-Temperatur hervorzurufen. Damit finden wir eine Analogie zu den Ergebnissen im 3. Kapitel, wo wir feststellten, daß nur eine geringe interplanare Austauschwechselwirkung ausreicht, um für die obere Grenze der spontanen Magnetisierung ein dreidimensionales Verhalten zu erzeugen.

Die reziproke Suszeptibilität χ^{-1} in beiden Näherungen ist als Funktion der Temperatur in Abbildung 7 (Seite 52) für das isotrope dreidimensionale, sowie das ein- und das zweidimensionale Modell noch einmal zusammengefaßt. Wie wir sehen, liegen die Funktionswerte der Suszeptibilität in der RPA immer unter denen in der MFA, wobei die letzteren für sehr hohe Temperaturen asymptotisch erreicht werden, wie wir bereits den Beziehungen (4.4.10) und (4.4.13) entnehmen können.

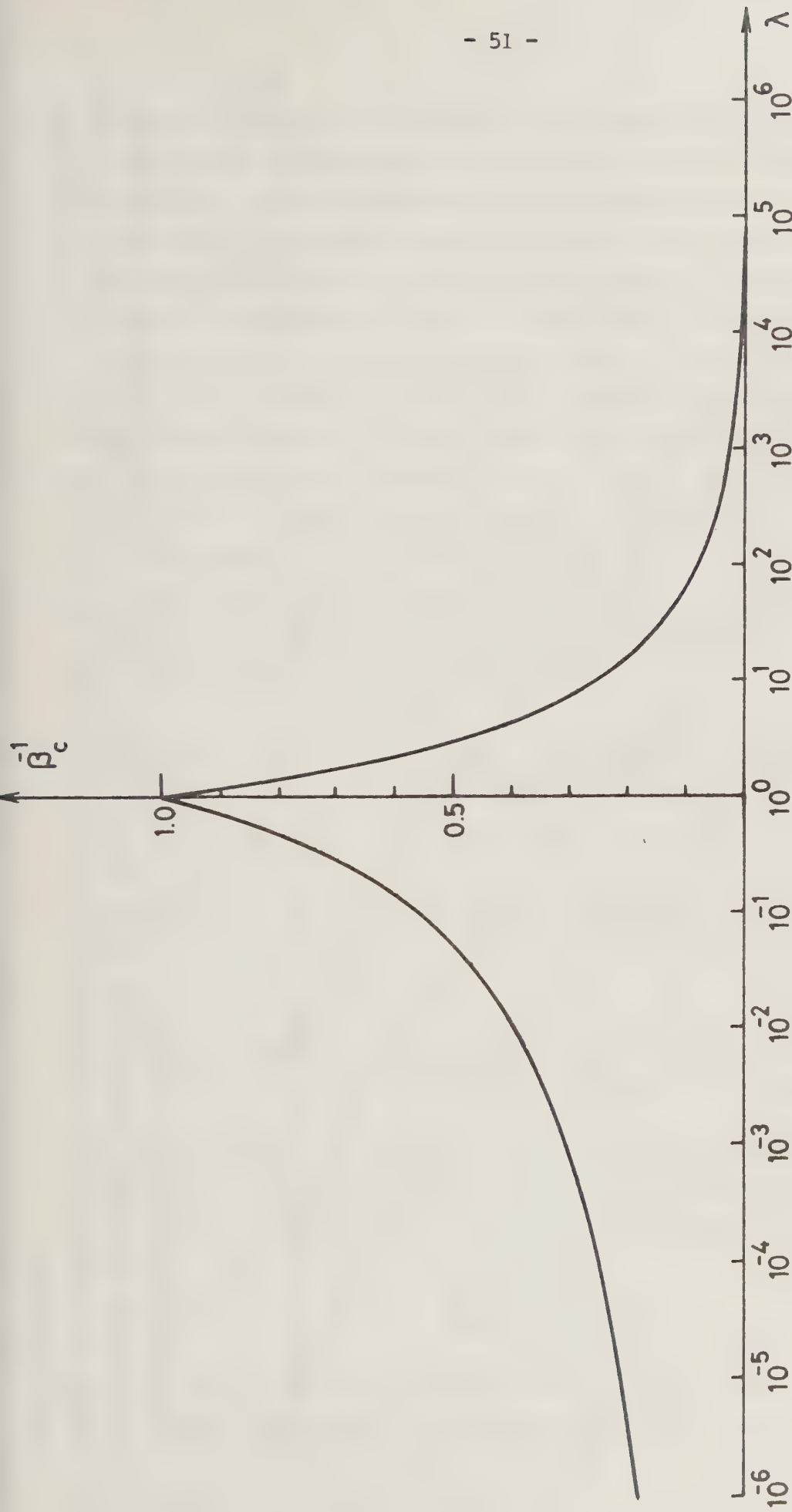


Abb. 6

Abhängigkeit der Curie-Temperatur in der RPA vom Verhältnis $\lambda = I_2 / I_1$ der Austauschwechselwirkungen I_2 und I_1 für das kubisch-einfache Gitter.

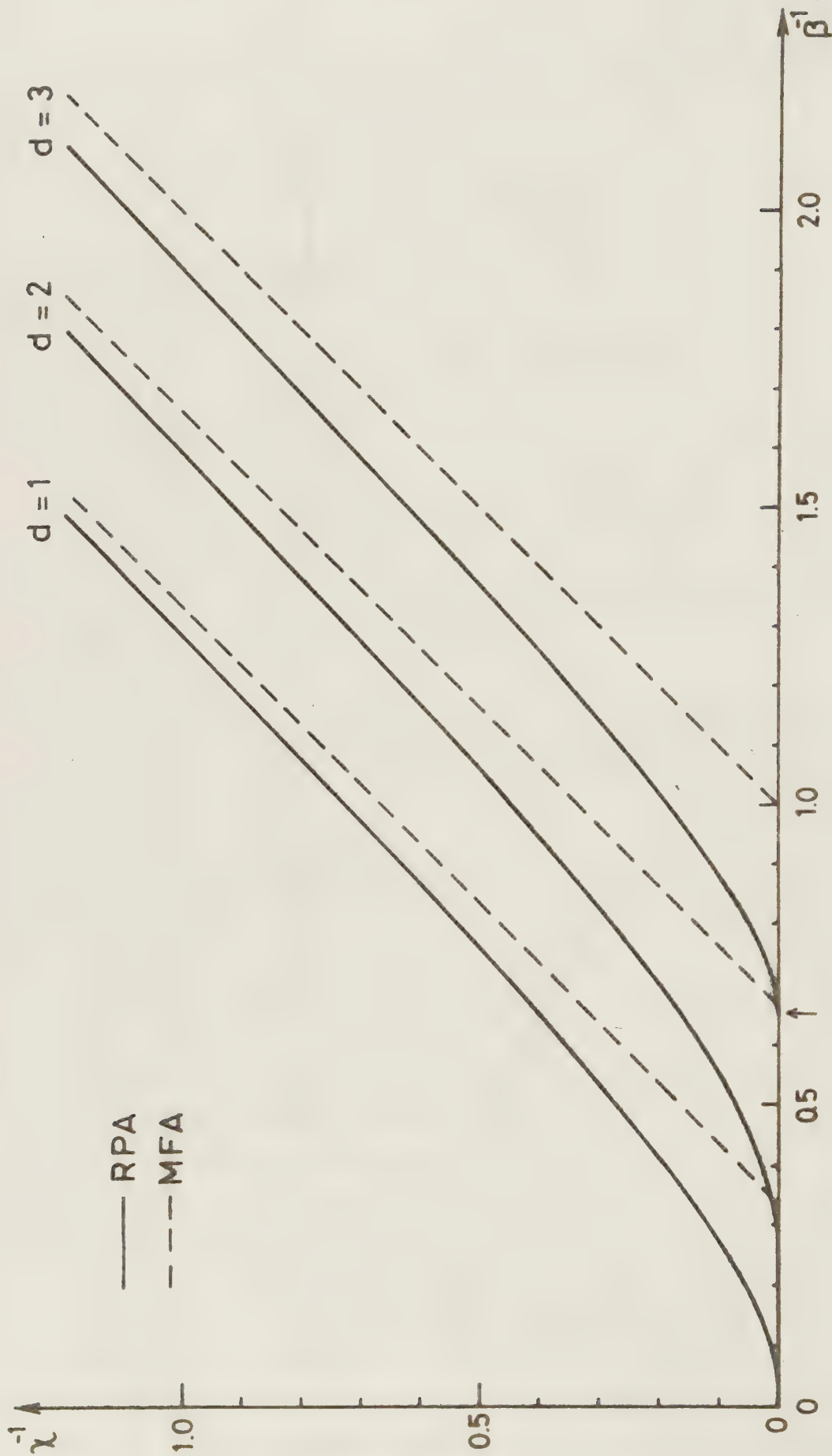


Abb. 7

Die Temperaturabhängigkeit der inversen Nullfeld-Suszeptibilität χ^{-1} isotroper d-dimensionaler Heisenberg-Ferromagnete in der RPA (d=3: kubisch-einfaches Gitter, d=2: quadratisches Gitter, d=1: lineare Kette). Die Temperatur ist in Einheiten der MFA-Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = 3I$ für d=3, χ^{-1} in Einheiten von $g\mu_B/2I$ angegeben.

Unsere Ergebnisse für die Curie-Temperatur und die Suszeptibilität lassen aber im Gegensatz zu denen der RPA die Möglichkeit eines Phasenübergangs in ein und zwei Dimensionen offen, wobei eine Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung vorliegen muß, wie sie nach MUBAYI und LANGE (1969) auch in zweidimensionalen Ferromagneten verwirklicht ist.

Zum Abschluß der Betrachtungen für die Hochtemperaturphase wollen wir noch die Beziehungen angeben, aus denen sich die Nächstnachbarkorrelationen bestimmen lassen. Dazu gehen wir wieder von den drei Ungleichungen (4.4.7) aus, die im Grenzfall $H' \rightarrow 0$ in Gleichungen übergehen und aus denen wir bereits die Abhängigkeit der Suszeptibilität von der Temperatur und den Kopplungskonstanten gewonnen haben. Setzen wir dieses Ergebnis ein, so können wir die Korrelationen $\mu_{||, \perp} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{||, \perp}}^+ \rangle$ aus jeweils zwei der drei Gleichungen

$$(4.4.14a) \quad 1 - 2\mu_{||} = \frac{1}{2\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{||}(k_1, k_2)}{\beta^{-1} - (2I_{||} + I_{\perp}) + \frac{I_{||}}{1 - 2\mu_{||}} E_{||}(k_1, k_2) + \frac{I_{\perp}}{1 - 2\mu_{\perp}} E_{\perp}(k_3)}$$

$$(4.4.14b) \quad 1 - 2\mu_{\perp} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\perp}(k_3)}{\beta^{-1} - (2I_{||} + I_{\perp}) + \frac{I_{||}}{1 - 2\mu_{||}} E_{||}(k_1, k_2) + \frac{I_{\perp}}{1 - 2\mu_{\perp}} E_{\perp}(k_3)}$$

$$(4.4.14c) \quad 1 = \frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\beta^{-1} - (2I_{||} + I_{\perp}) + \frac{I_{||}}{1 - 2\mu_{||}} E_{||}(k_1, k_2) + \frac{I_{\perp}}{1 - 2\mu_{\perp}} E_{\perp}(k_3)}$$

als Funktion der Temperatur und der Austauschwechselwirkungen bestimmen. Die longitudinalen Nächstnachbarkorrelationen

$\eta_{||, \perp} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{||, \perp}}^z \rangle$ erhält man über die einfachen Beziehungen

$$(4.4.15) \quad \eta_{||, \perp} = -\frac{1}{2} \mu_{||, \perp},$$

die in diesem Temperaturbereich gelten und aus (4.2.20) folgen, da die dortigen Gleichungen in

$$(4.4.16) \quad 2\eta + \mu = \frac{1}{2} \Theta C$$

umgeschrieben werden können und Renormalisierungsfaktoren sowie

Magnetisierung im Fall $H'=0$ verschwinden. Mit der Verknüpfung (4.4.15) finden wir den gleichen Zusammenhang zwischen den transversalen und longitudinalen Korrelationen, der in der RPA im paramagnetischen Temperaturbereich gilt (dazu siehe z.B. RISTIG (1964)), in der die transversalen Korrelationsfunktionen aus den Gleichungen

$$(4.4.17a) \quad \mu_{\parallel}^{RPA} = \frac{1}{2\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{2 - E_{\parallel}(k_1, k_2)}{\chi_{RPA}^{-1} + 2I_{\parallel}E_{\parallel}(k_1, k_2) + 2I_{\perp}E_{\perp}(k_3)}$$

und

$$(4.4.17b) \quad \mu_{\perp}^{RPA} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1 - E_{\perp}(k_3)}{\chi_{RPA}^{-1} + 2I_{\parallel}E_{\parallel}(k_1, k_2) + 2I_{\perp}E_{\perp}(k_3)}$$

im Zusammenhang mit (4.4.13) zu bestimmen sind.

Die numerische Auswertung der Integrale in (4.4.13), (4.4.14) und (4.4.17) wird ebenfalls noch zurückgestellt, um die Kurven für die Korrelationen im paramagnetischen Temperaturbereich zusammen mit den Ergebnissen der Tieftemperaturphase zu diskutieren.

Daß auch oberhalb der Curie-Temperatur die Symmetrie des Systems unter Drehungen für $H'=0$ gebrochen bleibt, muß man damit erklären, daß sowohl unsere Näherung als auch die RPA die longitudinalen und transversalen Korrelationsfunktionen nicht gleichartig behandelt. Denn wegen $s^z = \frac{1}{2} - s^-s^+$ ist die longitudinale Korrelation immer mit einer Greenschen Funktion höherer Ordnung verknüpft als die entsprechende transversale Korrelation. Durch eine Entkopplung der Bewegungsgleichungen für die Greenschen Funktionen bereits in der niedrigsten Ordnung kann daher im allgemeinen keine gleiche Behandlung der beiden Korrelationen μ und η gewährleistet sein.

Auch ohne numerische Auswertung der Integrale in (4.4.14) lassen sich schon Aussagen über die Korrelationen in einigen speziellen Fällen machen. Bei der Entartung unseres Systems in nicht miteinander wechselwirkende zweidimensionale Modelle einerseits und in Spinketten andererseits verschwinden die Korrelationen $\mu_{\perp}$ und $\eta_{\perp}$ bzw. $\mu_{\parallel}$ und $\eta_{\parallel}$. Das erstere entnimmt man den Gleichungen (4.4.14b) und (4.4.14c) im Fall $I_{\perp}=0$ in Verbindung mit (4.4.15), das letztere folgt entsprechend aus (4.4.14a) und (4.4.14c) sowie (4.4.15) für $I_{\parallel}=0$. Wie man ver-

nünftigerweise erwarten sollte, ist im isotropen dreidimensionalen Modell $\mu_{\parallel} = \mu_{\perp} = \mu$ eine Lösung des Systems (4.4.14). In diesem Fall bestimmt sich der Wert der transversalen Korrelationsfunktion μ für die Curie-Temperatur aus (4.4.14) zu

$$(4.4.18) \quad \mu_c = \mu(\beta_c) = \frac{1}{2} - \frac{1}{6} \left[\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{E_{\parallel}(k_1, k_2) + E_{\perp}(k_3)} \right]^{-1}.$$

Mit dem Wert

$$\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{3 - \cos k_1 - \cos k_2 - \cos k_3} = 0.50546...$$

für das Integral in (4.4.18), den WATSON (1939) erstmals angegeben hat, erhält man

$$(4.4.19) \quad \langle S_n^- S_{n+d}^+ \rangle_c = \mu_c = 0.17027... , \quad \langle S_n^z S_{n+d}^z \rangle_c = \eta_c = -0.085134... .$$

Diese Werte der Nächstnachbarkorrelationen am Curie-Punkt stimmen mit denen der RPA überein, in der allerdings die Curie-Temperatur tiefer liegt. Sicherlich erscheint es unbefriedigend, daß die longitudinale Korrelation am Curie-Punkt negative Werte annimmt, weil bei dieser Temperatur die Fernordnung einsetzt und ein negativer Wert von $\langle S_n^z S_{n+d}^z \rangle$ ja anzeigt, daß die z-Komponenten benachbarter Spins im statistischen Mittel entgegengesetztes Vorzeichen besitzen, während sich die ferromagnetische Ordnung gerade dadurch auszeichnet, daß die z-Komponenten aller Spins in die gleiche Richtung weisen. Da aber, wie wir bereits oben bemerkten, der negative Wert von $\eta(\beta_c)$ als Folge der Näherung angesehen werden kann, müssen wir schließen, daß sowohl in unserer Näherung als auch in der RPA das isotrope dreidimensionale Modell eines Ferromagneten in der Umgebung der Curie-Temperatur nicht optimal beschrieben wird. Als ein Kriterium für die Güte der durchgeführten Näherung kann daher die Größe des Temperaturbereichs unterhalb der Curie-Temperatur angesehen werden, in dem die longitudinale Korrelation ein negatives Vorzeichen besitzt. Dieser Gesichtspunkt sollte deshalb besondere Beachtung bei der Untersuchung der Tieftemperaturphase unseres Modells finden, der wir uns jetzt zuwenden wollen.

4.5. Die Tieftemperaturphase

Bei der Untersuchung unseres Modells für Temperaturen unterhalb des Curie-Punktes gehen wir weiterhin von dem System transzendenter Gleichungen (4.3.13) und (4.3.15) zur Bestimmung der Magnetisierung und der Renormalisierungsfaktoren für die Anregungsenergien aus, das ebenso als Gleichungssystem für **Magnetisierung** und Nächstnachbarkorrelationen aufgefaßt werden kann. Genau wie in der Hochtemperaturphase beschränken wir uns auf den Fall, daß das angelegte Magnetfeld verschwindet. Wie wir bereits bemerkten, ist das Gleichungssystem nur numerisch zu lösen. Bevor diese Lösungen aber dargestellt und diskutiert werden, wollen wir noch untersuchen, welche Ergebnisse einige bekannte Näherungsverfahren liefern. Diese umfassen nicht den gesamten Temperaturbereich der Tieftemperaturphase, und wir beschränken deshalb unsere Untersuchungen auf die Eigenschaften des Modells für Temperaturen unmittelbar über dem absoluten Nullpunkt einerseits und unterhalb der Curie-Temperatur andererseits.

4.5.1. Näherungen für sehr tiefe Temperaturen

Soll das Temperaturverhalten von Magnetisierung und Renormalisierungsfaktoren in unmittelbarer Nähe des absoluten Nullpunktes bestimmt werden, steht ein gängiges iteratives Verfahren zur Verfügung. Um es anwenden zu können, formen wir das System der Gleichungen (4.3.13) und (4.3.15) mittels der Identität (4.3.7) und der Reihenentwicklung

$$\frac{1}{e^x - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} \quad \text{für } x > 0$$

in

$$(4.5.1a) \quad \frac{1}{\theta} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{N} \sum_k \exp \left\{ -\eta \beta [2C_n I_n E_n(k_1, k_2) + 2C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)] \right\}$$

$$(4.5.1b) \quad \frac{1}{C} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{N} \sum_k E_n(k_1, k_2) \exp \left\{ -\eta \beta [2C_n I_n E_n(k_1, k_2) + 2C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)] \right\}$$

$$(4.5.1c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{N} \sum_k E_{\perp}(k_3) \exp \left\{ -\eta \beta [2C_n I_n E_n(k_1, k_2) + 2C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)] \right\}$$

um. Führen wir die modifizierten Besselfunktionen

$$(4.5.2) \quad I_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{z \cos \nu} \cos(n\nu) d\nu$$

und die Abkürzungen

$$(4.5.3) \quad x = \beta \cdot 2C_{||}I_0, \quad y = \beta \cdot 2C_{\perp}I_1$$

ein, erhalten wir für (4.5.1) in einem unendlich ausgedehnten Gitter

$$(4.5.4a) \quad \frac{1}{\epsilon} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [e^{-nx} I_0(nx)]^2 [e^{-ny} I_0(ny)]$$

$$(4.5.4b) \quad \frac{1}{C_{||}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [e^{-nx} I_0(nx)] [e^{-ny} I_0(ny)] [e^{-nx} (I_0(nx) - I_1(nx))]$$

$$(4.5.4c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [e^{-nx} I_0(nx)]^2 [e^{-ny} (I_0(ny) - I_1(ny))].$$

Für denjenigen Temperaturbereich, in dem $\beta I_0 \gg 1$ und $\beta I_1 \gg 1$ erfüllt ist, läßt sich die asymptotische Entwicklung der modifizierten Besselfunktionen (ABRAMOWITZ und STEGUN (1965), 377)

$$(4.5.5) \quad I_n(z) = \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} \left\{ 1 - \frac{4n^2 - 1}{8z} + \frac{(4n^2 - 1)(4n^2 - 9)}{2!(8z)^2} \dots \right\}, \quad z \gg 1$$

ausnutzen, um die Temperaturabhängigkeit von spontaner Magnetisierung und Renormalisierungsfaktoren iterativ zu bestimmen. Dazu werden in den Beziehungen

$$(4.5.6a) \quad \epsilon = 1 - \epsilon \cdot \frac{2}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{x \sqrt{y} n^{3/2}} \left(1 + \frac{1}{4nx} + \frac{1}{8ny} + \frac{5}{32n^2 x^2} + \frac{1}{32n^2 xy} + \frac{9}{128n^2 y^2} + \dots \right)$$

$$(4.5.6b) \quad C_{||} = 1 - \frac{1}{2\beta I_0} \frac{2}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{y} n^{3/2}} \left(\frac{1}{2nx} + \frac{1}{4n^2 x^2} + \frac{1}{16n^2 xy} + \dots \right)$$

$$(4.5.6c) \quad C_{\perp} = 1 - \frac{1}{2\beta I_1} \frac{2}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{x n^{3/2}} \left(\frac{1}{2n\sqrt{y}} + \frac{1}{8n^2 x \sqrt{y}} + \frac{3}{16n^2 y^{3/2}} + \dots \right),$$

die man durch Einsetzen der asymptotischen Entwicklung (4.5.5) in die Gleichungen (4.5.4) erhält, auf der rechten Seite in (4.5.6a) ϵ durch die gesamte rechte Seite von (4.5.6a) und die in den Termen $\frac{1}{x}$, $\frac{1}{y}$, $\frac{1}{y}$ auftretenden Größen $\frac{1}{C_{||}}$, $\frac{1}{C_{\perp}}$

rechten Seiten von (4.5.4b) und (4.5.4c) ersetzt. Die Ergebnisse der Entwicklung bis zur Ordnung β^{-3}

$$(4.5.7a) \quad \sigma = 1 - \frac{\zeta(3/2)}{4\pi^{3/2} I_u I_l^{1/2}} \beta^{-3/2} - \frac{\zeta(5/2)}{32\pi^{3/2} I_u I_l^{1/2}} \left(\frac{1}{I_u} + \frac{1}{2I_l} \right) \beta^{-5/2} + \frac{[\zeta(3/2)]^2}{16\pi^3 I_u^2 I_l} \beta^{-3} + o(\beta^{-3/2})$$

$$(4.5.7b) \quad C_{II} = 1 - \frac{\zeta(5/2)}{16\pi^{3/2} I_u^2 I_l^{1/2}} \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3/2})$$

$$(4.5.7c) \quad C_I = 1 - \frac{\zeta(5/2)}{16\pi^{3/2} I_u I_l^{3/2}} \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3/2}),$$

in denen $\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$ die Riemannsche ζ -Funktion bezeichnet, lassen bereits Unterschiede zur RPA erkennen, in der das entsprechende Resultat für die spontane Magnetisierung

$$(4.5.8) \quad \sigma^{RPA} = 1 - \frac{\zeta(3/2)}{4\pi^{3/2} I_u I_l^{1/2}} \beta^{-3/2} - \frac{\zeta(5/2)}{32\pi^{3/2} I_u I_l^{1/2}} \left(\frac{1}{I_u} + \frac{1}{2I_l} \right) \beta^{-5/2} - \frac{[\zeta(3/2)]^2}{32\pi^3 I_u^2 I_l} \beta^{-3} + o(\beta^{-3/2})$$

lautet.

Zwar sind die ersten drei Terme der Entwicklung für σ in beiden Näherungen identisch, so daß bei sehr tiefen Temperaturen kein Unterschied in der spontanen Magnetisierung zu bemerken sein wird. Aber die Koeffizienten der β^{-3} -Terme zeigen an, daß die Abnahme in der RPA doch ein wenig schneller erfolgt in Übereinstimmung damit, daß in dieser Näherung die Curie-Temperatur tiefer liegt.

Betrachtet man die Abhängigkeit der spontanen Magnetisierung von den Kopplungskonstanten I_u und I_l , so stellt man fest, daß in beiden Näherungen, ausgehend vom isotropen dreidimensionalen Modell, die Magnetisierung bei einer Abnahme von I_u stärker abfällt als bei einer gleichgroßen Verringerung von I_l . Damit liegt die gleiche Tendenz vor, die wir schon im vorhergehenden Kapitel bei der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung festgestellt haben.

Abschließend geben wir noch die Temperaturabhängigkeit der Nächstnachbarkorrelationen und der inneren Energie zu

$$(4.5.9a) \quad \mu_{\parallel} = \frac{\beta^{(3/2)}}{8\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \beta^{-3/2} - \frac{\beta^{(5/2)}}{64\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \left(\frac{1}{I_{\parallel}} - \frac{1}{2I_{\perp}} \right) \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3})$$

$$(4.5.9b) \quad \mu_{\perp} = \frac{\beta^{(3/2)}}{8\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \beta^{-3/2} - \frac{\beta^{(5/2)}}{64\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \left(\frac{3}{2I_{\perp}} - \frac{1}{I_{\parallel}} \right) \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3})$$

$$(4.5.9c) \quad \eta_{\parallel} = \frac{1}{4} - \frac{\beta^{(3/2)}}{8\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \beta^{-3/2} - \frac{\beta^{(5/2)}}{128\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \left(\frac{2}{I_{\parallel}} + \frac{1}{I_{\perp}} \right) \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3})$$

$$(4.5.9d) \quad \eta_{\perp} = \frac{1}{4} - \frac{\beta^{(3/2)}}{8\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \beta^{-3/2} - \frac{\beta^{(5/2)}}{128\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \left(\frac{3}{I_{\parallel}} + \frac{1}{I_{\perp}} \right) \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3})$$

und

$$(4.5.10) \quad U = \langle \mathcal{H} \rangle_{n'=0} = -N \left(I_{\parallel} + \frac{I_{\perp}}{2} \right) + N \frac{3\beta^{(5/2)}}{16\pi^{3/2} I_{\parallel} I_{\perp}^{1/2}} \beta^{-5/2} + o(\beta^{-3})$$

an, die wir über die Beziehungen (4.3.12) und (4.2.20) mit Hilfe der Entwicklungen für $\mathcal{G}$, $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ erhalten. Ein Vergleich mit den entsprechenden Resultaten in der RPA zeigt bis zur angegebenen Ordnung in β^{-1} eine völlige Übereinstimmung in allen Größen.

Wir sehen also, daß ein Abweichen von der Isotropie sich in diesem Temperaturbereich nur in einer äußerst geringen Aufspaltung der Lösungen für die Korrelationen zwischen unterschiedlich gekoppelten Spins widerspiegeln wird, denn während die Entwicklungen für $\mu_{\parallel}$ und $\mu_{\perp}$ in der ersten Ordnung übereinstimmen, ist für $\eta_{\parallel}$ und $\eta_{\perp}$ sogar bis zur Ordnung $\beta^{-5/2}$ kein Unterschied festzustellen.

Im Bereich sehr tiefer Temperaturen besteht damit zwischen beiden Näherungen lediglich in der Temperaturabhängigkeit der Renormalisierung der Spinwellenenergien ein bemerkenswerter Unterschied. Während in der RPA die Renormalisierung mit der spontanen Magnetisierung erfolgt und ihre Abnahme demnach in erster Ordnung einem $\beta^{-3/2}$ -Gesetz gehorcht, ist in der von uns gewählten Approximation die Abnahme der Größen $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ wegen der $\beta^{-5/2}$ -Gesetzmäßigkeit nicht so stark, und das bedeutet, die für das Umklappen eines Spins erforderliche Energie ist größer als in der RPA. Die hier gefundene Renormali-

sierung erscheint allerdings angemessener zu sein, denn wie KEFFER und LOUDON (1961) ausführten, ist bei der Anregung einer zusätzlichen Spinwelle mit großer Wellenlänge - und nur diese sind bei tiefen Temperaturen in nennenswerter Zahl angeregt - die Zunahme der Austauschenergie und damit die Abnahme der Renormalisierung der Elementaranregungsenergie eher durch den Cosinus des Winkels zwischen benachbarten Spins als durch den Cosinus des Winkels zwischen Magnetisierung und Spin wie in der RPA gegeben. Nun wird aber die innere Energie eines Heisenberg-Ferromagneten hauptsächlich durch die Cosinus der Zwischenwinkel benachbarter Spins bestimmt, und wie $\langle \mathcal{H} \rangle$ weisen auch die Renormalisierungsfaktoren eine $\beta^{-\frac{1}{2}}$ -Temperaturabhängigkeit auf.

Die Grenzen unserer Tieftemperaturentwicklungen bei zunehmender Anisotropie in den Kopplungskonstanten $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ sind durch die Bedingung $\beta I_{\parallel} \gg 1$ für den Fall, daß unser Modell zu schwach wechselwirkende Spinketten entartet, und durch die Bedingung $\beta I_{\perp} \gg 1$ für den Fall gegeben, daß wir schwach gekoppelte Netzebenen betrachten. Die Untersuchungen der Eigenschaften von Systemen mit extremer Anisotropie für sehr tiefe Temperaturen muß daher in einer modifizierten Weise erfolgen und soll gesondert in den beiden folgenden Abschnitten vorgenommen werden.

4.5.1.1. Schwach gekoppelte Netzebenen ($I_{\perp} \ll I_{\parallel}$)

Zuerst untersuchen wir das Modell, in dem zwischen benachbarten Spins in unterschiedlichen (001)-Netzebenen nur eine sehr schwache Wechselwirkung besteht ($I_{\perp} \ll I_{\parallel}$). Speziell soll auch die vollständige Entkopplung der Netzebenen möglich sein. Somit können wir zwar die Voraussetzung $\beta I_{\parallel} \gg 1$ des vorhergehenden Abschnitts übernehmen, müssen aber die Annahme $\beta I_{\perp} \gg 1$ fallenlassen. Für diese Systeme mit einer nichtverschwindenden, wenn auch sehr schwachen Kopplung $I_{\perp}$, gibt es immer einen Temperaturbereich in der Umgebung des Nullpunktes, in dem die Entwicklungen des vorhergehenden Abschnitts ihre Gültigkeit behalten, aber dieser Bereich schrumpft mit abnehmender Kopplung $I_{\perp}$ immer mehr zusammen. Wenn wir zwar auch weiterhin das Verhalten bei sehr tiefen Temperaturen beschreiben wollen, so werden wir uns aber doch auf solche Werte von β beschrän-

ken, die mit den Bedingungen $\beta \bar{I}_n \gg 1$ und $\beta \bar{I}_\perp \ll 1$ verträglich sind. Mit einer hinreichend schwachen Wechselwirkung $I_\perp$ können wir demnach immer beliebig nahe an den Temperaturnullpunkt gelangen.

Zwar können wir auch jetzt noch von den Entwicklungen (4.5.1) und (4.5.4) für die spontane Magnetisierung und die Renormalisierungsfaktoren Gebrauch machen, müssen aber statt (4.5.6) wegen der nur noch teilweise möglichen asymptotischen Entwicklung der Bessel-Funktionen das System

$$(4.5.11a) \quad \frac{1}{\sigma} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n x} \left(1 + \frac{1}{8nx} + \frac{9}{128n^2 x^2} + \dots \right)^2 e^{-ny} I_0(ny)$$

$$(4.5.11b) \quad \frac{1}{C_{||}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n x} \left(1 + \frac{1}{8nx} + \frac{9}{128n^2 x^2} + \dots \right) \left(\frac{1}{2nx} + \frac{3}{16n^2 x^2} + \dots \right) e^{-ny} I_0(ny)$$

$$(4.5.11c) \quad \frac{1}{C_\perp} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n x} \left(1 + \frac{1}{8nx} + \frac{9}{128n^2 x^2} + \dots \right)^2 e^{-ny} (I_0(ny) - I_1(ny))$$

betrachten, wobei weiterhin die in (4.5.3) angegebenen Abkürzungen für x und y gelten. Von ausschlaggebender Bedeutung für die Ergebnisse dieses Abschnitts sind einige Eigenschaften der Reihen

$$(4.5.12) \quad R_{0m}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} I_0(ny)}{n^m}, \quad R_{1m}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} (I_0(ny) - I_1(ny))}{n^m} \quad m \geq 1$$

in (4.5.11), die im ersten Teil des Anhangs 4 untersucht werden, in dem auch weitere Näherungen in dem Gleichungssystem (4.5.11) vorgenommen werden. Die dort gewonnenen Ergebnisse können wir in den folgenden asymptotischen Entwicklungen und transzendenten Gleichungen

$$(4.5.13) \quad \frac{1-\sigma}{\sigma} = \frac{\beta^{-1}}{2\pi \bar{I}_n} \left\{ S_0 + \ln \frac{1}{2\beta \bar{I}_\perp \sigma} \right\}$$

$$(4.5.14a) \quad C_{||} = 1 - \frac{f(2)}{8\pi \bar{I}_n^2} \beta^{-2} - \frac{f(3)}{32\pi \bar{I}_n^3} \beta^{-3} + o(\beta^{-4})$$

$$(4.5.14b) \quad \frac{1-C_\perp}{C_\perp} = \frac{\beta^{-1}}{2\pi \bar{I}_n} \left\{ S_1 + \ln \frac{1}{2\beta \bar{I}_\perp C_\perp} \right\}$$

für die spontane Magnetisierung G , die Renormalisierungsfaktoren $C_{||}$ und $C_{\perp}$ sowie

$$(4.5.15a) \quad \mu_{||} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{1}{2\pi I_{||}} \beta^{-1} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{2I_{||}(1-2\mu_{||})} \right\}}{1 + \frac{1}{2\pi I_{||}} \beta^{-1} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{2I_{||}(1-2\mu_{||})} \right\}}$$

$$(4.5.15b) \quad \mu_{\perp} = \frac{(S_0 - S_1) \beta^{-1}}{4\pi I_{||}} \cdot \frac{1}{1 + \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{||}} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{8\pi I_{||} I_{\perp} \mu_{\perp}} \right\}}$$

$$(4.5.16a) \quad \eta_{||} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1 - \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{||}} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{(4\eta_{||} + 1) I_{||}} \right\}}{1 + \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{||}} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{(4\eta_{||} + 1) I_{||}} \right\}}$$

$$(4.5.16b) \quad \eta_{\perp} = -\frac{1}{4} \cdot \left\{ \frac{S_0 - S_1}{2\pi I_{||}} \beta^{-1} G - \frac{G^2}{1 + \frac{S_1 - S_0}{2\pi I_{||}} \beta^{-1} G} \right\}$$

für die transversalen und longitudinalen Korrelationen $\mu_{||}$ und $\mu_{\perp}$ bzw. $\eta_{||}$ und $\eta_{\perp}$ zusammenfassen, wobei die Konstanten S_0 und S_1 die Integrale

$$(4.5.17a) \quad S_0 = \int_0^{\infty} dx \frac{e^{-x} (I_0(x) - 1)}{x} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-1)!}{2^{2k} (k!)^2}$$

$$(4.5.17b) \quad S_1 = \int_0^{\infty} dx \frac{e^{-x} (I_0(x) - I_1(x) - 1)}{x} = -\frac{1}{4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{2^{2k} [(k+1)!]^2}$$

bedeuten. Eine entsprechende Untersuchung in der RPA liefert in der gleichen Näherung die transzendente Gleichung

$$(4.5.18) \quad 1 - G^{RPA} = \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{||}} \left\{ S_0 + \ln \frac{1}{2\beta I_{||} G^{RPA}} \right\}$$

für die spontane Magnetisierung. Obwohl in der RPA die Curie-Temperatur mit $I_{\perp} \rightarrow 0$ verschwindet, ist es durchaus sinnvoll, auch hier den Temperaturbereich $\beta I_{\perp} \gg 1$ und $\beta I_{\perp} \ll 1$ zu untersuchen, da $(\beta_c^{RPA})^{-1}$ nicht proportional $I_{\perp}$, sondern wie aus Abb. 6 (Seite 51) ersichtlich ist, wesentlich langsamer ver-

schwindet. Ein Vergleich der Relationen (4.5.18) und (4.5.13) zeigt, daß die Werte der spontanen Magnetisierung in beiden Näherungen nicht sehr stark voneinander differieren, denn ein Unterschied in beiden Lösungen kann erst in der Ordnung β^{-2} auftreten. Damit können wir eine gleich gute Übereinstimmung der Ergebnisse für die spontane Magnetisierung wie in den Modellen mit schwacher Anisotropie feststellen.

Die beiden Gleichungen (4.5.13) und (4.5.18) lassen sich mit Resultaten von MIKESKA (1973) vergleichen, der in einem Modell mit zusätzlicher geringer Anisotropie im Spinraum dieselbe Entkopplung in den Bewegungsgleichungen für die Greenschen Funktionen wie wir vorgenommen hat, sieht man von den Modifikationen ab, die wegen der Einführung der Spinanisotropie notwendig wurden. Unter der Voraussetzung, daß $\ln \frac{1}{\beta I_{\perp} S} \gg S_0$ erfüllt ist, können wir MIKESKA's Resultate bestätigen, aber die Berücksichtigung der von MIKESKA nicht angegebenen Konstanten S_0 läßt auch noch die numerische Auswertung bis zu Anisotropieverhältnissen $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel}$ der Größenordnung 10^{-2} zu.

Keinen sehr großen Unterschied können wir in den Ergebnissen für die spontane Magnetisierung und den Renormalisierungsfaktor $C_{\perp}$ in diesem Temperaturbereich erwarten, denn deren Bestimmungsgleichungen (4.5.13) und (4.5.14b) unterscheiden sich lediglich in den Konstanten S_0 und S_1 . Für den Fall, daß die logarithmischen Terme nicht gegenüber diesen Größen dominieren, finden wir in erster Näherung eine lineare Temperaturabhängigkeit.

$$(4.5.19) \quad G \approx 1 - \text{const.} \cdot \beta^{-1}, \quad C_{\perp} \approx 1 - \text{const.} \cdot \beta^{-1}$$

im Gegensatz zur $\beta^{-3/2}$ -Gesetzmäßigkeit von G und dem $\beta^{-5/2}$ -Verhalten von $C_{\perp}$ bei schwacher Anisotropie. Dagegen tritt bei Zunahme der Anisotropie in der Temperaturabhängigkeit des Renormalisierungsfaktors $C_{\parallel}$, der in erster Näherung nicht mehr von der Kopplungskonstanten $I_{\perp}$ abhängt, keine so deutliche Änderung ein. Das $\beta^{-3/2}$ -Verhalten dieser Größe hat sich in eine β^{-2} -Gesetzmäßigkeit verwandelt. Wiederum einen linearen Temperaturverlauf finden wir mit

$$(4.5.20) \quad \mu_{\parallel} \sim \beta^{-1}, \mu_{\perp} \sim \beta^{-1}, \eta_{\parallel} \approx \frac{1}{4} - \text{const.} \cdot \beta^{-1}, \eta_{\perp} \approx \frac{1}{4} - \text{const.} \cdot \beta^{-1}$$

in allen Nächstnachbarkorrelationen im Gegensatz zur $\beta^{-3/2}$ -Abhängigkeit im vorhergehenden Abschnitt.

Im Grenzfall $I_{\perp} = 0$, der Entkopplung in voneinander unabhängige quadratische Gitter, ergeben sich schließlich als Lösungen des Gleichungssystems (4.5.11)

$$(4.5.21) \quad \zeta = C_{\perp} = 0, \quad C_{\parallel} = 1 - \frac{\beta^{(2)}}{8\pi I_{\parallel}} \beta^2 + o(\beta^{-3})$$

und für die Korrelationen die von Temperatur und Kopplungskonstanten unabhängige Werte

$$(4.5.22) \quad \mu_{\parallel} = \frac{1}{2}, \mu_{\perp} = 0, \eta_{\parallel} = -\frac{1}{4}, \eta_{\perp} = 0.$$

Die Resultate für ζ , $C_{\parallel}$, $\mu_{\parallel}$ und $\eta_{\parallel}$ stehen in Einklang mit den Ergebnissen der Untersuchungen von MUBAYI und LANGE (1969) am zweidimensionalen Modell. In Übereinstimmung mit dem Theorem von MERMIN und WAGNER liegt also eine Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung vor, in der der zweidimensionale Anteil im Anregungsspektrum überlebt und die x,y-Komponenten benachbarter Spins maximal korreliert sind, die z-Komponenten hingegen in entgegengesetzte Richtungen weisen, was allerdings mit der Vorstellung von einer geordneten Phase eines Ferromagneten nicht zu vereinbaren ist.

Aber wie wir gesehen haben, weichen bereits bei einer sehr kleinen Kopplung $I_{\perp}$ - als realistisch kann noch ein Wechselwirkungsverhältnis $I_{\perp}/I_{\parallel}$ von 10^{-3} bis 10^{-4} angesehen werden - die Resultate stark vom zweidimensionalen Verhalten ab, ohne jedoch auf der anderen Seite schon die Abhängigkeiten des isotropen dreidimensionalen Modells zu zeigen.

4.5.1.2. Schwach gekoppelte Spinketten ($I_{\parallel} \ll I_{\perp}$)

In diesem Abschnitt wollen wir untersuchen, welches Verhalten unser Modell vorhersagt, wenn es schwach wechselwirkende Spinketten beschreibt. In Analogie zu den vorangegangenen Betrachtungen über schwach gekoppelte Flächengitter beschränken wir uns auf Temperaturen, die mit den Bedingungen $\beta I_{\perp} \gg 1$ und

$\beta I_{||} \ll 1$ verträglich sind. Da wir im Prinzip wie im letzten Abschnitt vorgehen wollen, müssen wir das Gleichungssystem (4.5.4) in der Form

$$(4.5.23a) \quad \frac{1}{\sigma} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [e^{-nx} I_0(nx)]^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi ny}} \left(1 + \frac{1}{8ny} + \frac{9}{128n^2y^2} + \dots \right)$$

$$(4.5.23b) \quad \frac{1}{C_{||}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [e^{-nx} I_0(nx)] [e^{-nx} (I_0(nx) - I_1(nx))] \frac{1}{\sqrt{2\pi ny}} \left(1 + \frac{1}{8ny} + \frac{9}{128n^2y^2} + \dots \right)$$

$$(4.5.23c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [e^{-nx} I_0(nx)]^2 \left(\frac{1}{2ny} + \frac{13}{64n^2y^2} + \dots \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi ny}}$$

betrachten. Die Untersuchung von (4.5.23) wird im zweiten Teil des Anhangs 4 vorgenommen, aus dem wir als Ergebnis die folgenden asymptotischen Entwicklungen

$$(4.5.24a) \quad G = \frac{2}{2 + \frac{2A}{\sqrt{\pi I_{\perp}}} \beta^{-1/2} + \frac{3B'}{2\pi I_{\perp} I_{||}} \beta^{-2} + \frac{B}{\sqrt{2\pi I_{\perp} I_{||}}} \beta^{-1} \sqrt{\frac{B'^2}{2\pi I_{\perp} I_{||}} \beta^{-2} + 4 + \frac{4A}{\pi I_{\perp}} \beta^{-1/2}}}$$

$$(4.5.24b) \quad C_{||} = \frac{2}{2 + \frac{2A}{\sqrt{\pi I_{\perp}}} \beta^{-1/2} + \frac{B'^2}{2\pi I_{\perp} I_{||}} \beta^{-2} + \frac{B'}{\sqrt{2\pi I_{\perp} I_{||}}} \beta^{-1} \sqrt{\frac{B'^2}{2\pi I_{\perp} I_{||}} \beta^{-2} + 4 + \frac{4A}{\pi I_{\perp}} \beta^{-1/2}}}$$

$$(4.5.24c) \quad C_{\perp} = 1 - \frac{f(\frac{1}{2})}{4\pi^{1/2} I_{\perp}^{1/2}} \beta^{-3/2} + o(\beta^{-5/2})$$

mit den Konstanten

$$(4.5.25) \quad A = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} \left(\frac{1}{e^u - 1} - \frac{1}{u} \right), \quad B = \sqrt{\frac{1}{2}} + \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-2u} [(I_0(u))^2 - 1]$$

$$B' = \sqrt{\frac{1}{2}} + \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-2u} [I_0(u)(I_0(u) - I_1(u)) - 1]$$

für die spontane Magnetisierung und die Renormalisierungsfaktoren $C_{||}$ und $C_{\perp}$ übernehmen.

So wie im Fall $I_{\perp} \ll I_{||}$ die Ergebnisse für G und $C_{\perp}$ sich nicht allzusehr unterscheiden, weichen jetzt die Werte von G

und $C_{\parallel}$ nicht stark voneinander ab. Für $I_{\parallel}=0$ verschwindet auch hier die spontane Magnetisierung und dazu der Renormalisierungsfaktor $C_{\parallel}$, es überlebt also der eindimensionale Anteil im Anregungsspektrum. Dessen Renormalisierungsfaktor weist dagegen nochmals eine stärkere Abnahme von seinem Wert bei $T=0$ auf, nach einem $\beta^{-5/2}$ - und einem β^{-2} -Gesetz im isotropen dreidimensionalen und im zweidimensionalen Fall finden wir jetzt in der linearen Kette ein $\beta^{-3/2}$ -Verhalten. Allerdings gehen ζ und $C_{\perp}$ hier bei der Entkopplung zu Spinketten infolge einer anderen funktionalen Abhängigkeit von der Kopplungskonstanten gegen Null. Während wir jetzt wegen

$$(4.5.26) \quad \zeta \approx \frac{2\pi I_{\perp} I_{\parallel}}{8\beta' \beta^{-1/2}}, \quad C_{\parallel} \approx \frac{2\pi I_{\perp} I_{\parallel}}{8^{1/2} \beta^{-2}}$$

für $I_{\parallel} \rightarrow 0$ eine lineare Abhängigkeit von $I_{\parallel}$ beobachten können, wurde bei der Entkopplung zu Flächengittern das Verschwinden von ζ und $C_{\perp}$ durch einen Term $\ln \frac{1}{I_{\perp}}$ in den Bestimmungsgleichungen (4.5.13) und (4.5.14b) für diese Größen hervorgerufen. Wir dürfen also jetzt wesentlich stärkere Effekte bei denselben Anisotropieverhältnissen erwarten. Damit wird für die Abnahme der spontanen Magnetisierung die Aussage bestätigt, die wir im dritten Kapitel lediglich für deren obere Grenze aufstellen konnten.

Für die Nächstnachbarkorrelationen erhalten wir im Grenzfall $I_{\parallel}=0$ mit

$$(4.5.27) \quad \mu_{\parallel} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{8'}{8}\right) = 0.1274\dots, \mu_{\perp} = \frac{1}{2}, \eta_{\parallel} = \frac{1}{4} \left(\frac{8'}{8} - 1\right) = -0.0637\dots, \eta_{\perp} = -\frac{1}{4}$$

ebenfalls temperatur- und wechselwirkungsunabhängige Ergebnisse, die mittels (4.5.24) über (4.3.12) und (4.2.20) gewonnen wurden. Wie für $I_{\perp}=0$ im Flächengitter sind also auch die x,y-Komponenten benachbarter Spins in der linearen Kette maximal korreliert, während die z-Komponenten in entgegengesetzte Richtungen weisen. Im Gegensatz zu den Flächengittern verschwinden jetzt allerdings nicht die Korrelationen zwischen den entkoppelten Spins. Damit stehen die Resultate für die spontane Magnetisierung und die longitudinale Korrelation $\eta_{\parallel} = \langle s_{\parallel}^z s_{\parallel+\delta_{\parallel}}^z \rangle$ im Widerspruch zueinander, denn ohne Wechselwirkung zwischen den Spins faktorisiert die Korrelation gemäß

$$(4.5.28) \quad \eta_{||} = \langle S_n^z S_{n+\delta_{||}}^z \rangle = \langle S_n^z \rangle \langle S_{n+\delta_{||}}^z \rangle = \langle S^z \rangle^2 = \frac{\zeta^2}{4},$$

so daß Ergebnisse $\eta_{||} \neq 0$ und $\zeta = 0$ eigentlich nicht auftreten dürften. Die angewandte Entkopplung der Greenschen Funktionen liefert hier also thermodynamisch inkonsistente Resultate, und benachbarte Spinketten behalten nach dem Abschalten der Wechselwirkung sozusagen noch eine "Erinnerung" daran, daß einmal eine Kopplung zwischen ihnen bestand.

Die Untersuchungen an unserem Modell für sehr tiefe Temperaturen haben ergeben, daß bei nicht allzustark ausgeprägter Anisotropie in den Kopplungskonstanten $I_{||}$ und $I_{\perp}$ in unserer Näherung keine Unterschiede in der Temperaturabhängigkeit einer Reihe von thermodynamischen Größen zu den Ergebnissen der RPA bestehen. So finden wir in der Abnahme der spontanen Magnetisierung von ihrem Sättigungswert hier wie dort das $T^{3/2}$ -Gesetz der Spinwellentheorie wieder. Mit derselben Gesetzmäßigkeit im Temperaturverlauf erfolgt die Zunahme der Korrelationen $\mu_{||,\perp} = \langle S_n^- S_{n+\delta_{||,\perp}}^+ \rangle$ und die Abnahme der Korrelationen $\eta_{||,\perp} = \langle S_n^z S_{n+\delta_{||,\perp}}^z \rangle$ von ihren Werten bei $T=0$. Lediglich in der Renormalisierung der Anregungsenergie $E(\vec{k})$ unterscheiden sich beide Näherungen. Dabei halten wir das hier gefundene Resultat für angemessener, denn im Heisenberg-Modell sollte bei tiefen Temperaturen die Renormalisierung nicht wie in der RPA mit der Magnetisierung sondern mit einem Faktor erfolgen, der der inneren Energie proportional ist, und wir fanden für die innere Energie und die Renormalisierungsfaktoren die gleiche $\beta^{-5/2}$ -Gesetzmäßigkeit im Temperaturverlauf.

Ein derartiger Vergleich beider Approximationen läßt sich in den beiden Fällen extremer Anisotropie in der Austauschwechselwirkung nur noch bedingt durchführen, weil mit der Entartung zu Flächengittern und Spinketten in der RPA die geordnete Phase verschwindet. Wir finden dann allerdings noch eine Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung vor, wobei die Fernordnung beim Übergang zu nichtwechselwirkenden Spinketten wesentlich schneller zusammenbricht als beim Verschwinden der Kopplung zwischen den verschiedenen Netzebenen. Diese Erscheinung steht damit in Einklang mit den Ergebnissen

für die obere Schranke der spontanen Magnetisierung im 3. Kapitel.

Im quasi-zweidimensionalen Modell reicht bereits eine sehr geringe Kopplung I_1 aus, um auch für die Korrelationen ein starkes Abweichen von den Ergebnissen im Flächengitter zu erzeugen. Allerdings ist der Einfluß der niedrigeren Dimension noch insofern zu spüren, daß die Temperaturabhängigkeit sich vom Verhalten im isotropen dreidimensionalen Magneten unterscheidet, statt einer $T^{3/2}$ -Gesetzmäßigkeit finden wir einen linearen Temperaturverlauf. Die Resultate für die Korrelationen im quasi-eindimensionalen Modell hingegen decken Unzulänglichkeiten in unserer Näherungsmethode auf, da sie teilweise unrealistisch und für den Fall der Entkopplung zu Spinketten thermodynamisch inkonsistent sind.

4.5.2. Näherungen für Temperaturen unterhalb des Curie-Punktes

In einem zweiten Bereich der geordneten Phase wollen wir jetzt die Abhängigkeit der spontanen Magnetisierung, der Renormalisierungsfaktoren und der Nächstnachbarkorrelationen von der Temperatur und den Wechselwirkungskonstanten kennenlernen. Beim Aufsuchen von Näherungslösungen der Gleichungen (4.3.13) und (4.3.15) unmittelbar unterhalb der Curie-Temperatur können wir davon ausgehen, daß am Curie-Punkt die Renormalisierungsfaktoren verschwinden, wenn kein äußeres Magnetfeld angelegt ist. Berücksichtigen wir deshalb beim Einsetzen der Reihenentwicklung

$$(4.5.29) \quad \coth x = \frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{2^{2n} B_n}{(2n)!} x^{2n-1} \quad B_n: \text{Bernoullische Zahlen}$$

lediglich die ersten beiden Summanden ¹⁾, so führen uns (4.3.13) und (4.3.15) auf die Gleichungen

1) Die 2. Ordnung in der Reihenentwicklung muß noch berücksichtigt werden, da anderenfalls aus (4.5.30b) und (4.5.30c) folgen würde, daß die Resultate nur für die Curie-Temperatur Gültigkeit besäßen.

$$(4.5.30a) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{C_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta}{3} \frac{1}{N} \sum_k (C_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$(4.5.30b) \quad \frac{1}{C_{||}} = \frac{1}{2\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{||}(k_1, k_2)}{C_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta}{6} \frac{1}{N} \sum_k E_{||}(k_1, k_2) (C_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$(4.5.30c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\perp}(k_3)}{C_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta}{3} \frac{1}{N} \sum_k E_{\perp}(k_3) (C_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$E_{||}(k_1, k_2) = 2 - \cos k_1 - \cos k_2, \quad E_{\perp}(k_3) = 1 - \cos k_3,$$

die im einzelnen im 1. Teil des Anhangs 5 untersucht werden. Dort finden wir unter der Voraussetzung, daß keine der beiden Kopplungskonstanten $I_{||}$ und $I_{\perp}$ verschwindet, mit

$$(4.5.31) \quad G = b(\beta, I_{||}, I_{\perp}) \sqrt{\beta_c^{-1} - \beta^{-1}}, \quad C_{||, \perp} = a_{||, \perp}(\beta, I_{||}, I_{\perp}) \sqrt{\beta_c^{-1} - \beta^{-1}}$$

$$a_{||, \perp}(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) \neq 0, \quad b(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) \neq 0$$

die gleiche Gesetzmäßigkeit in der Abnahme der spontanen Magnetisierung und der Renormalisierungsfaktoren bei Annäherung an die Curie-Temperatur $\beta_c^{-1} = 2I_{||} + I_{\perp}$. Für das isotrope dreidimensionale Modell können wir die Lösungen mit

$$(4.5.32a) \quad G = \frac{\sqrt{\frac{2}{3} \beta^{-1} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}}{W \beta^{-1} + \frac{2}{7} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})} \quad W = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} d^3k \frac{1}{3 - \cos k_1 - \cos k_2 - \cos k_3}$$

$$(4.5.32b) \quad C_{||} = C_{\perp} = C = \frac{1}{I} \sqrt{\frac{2}{7} \beta^{-1} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}$$

sogar explizit angeben. In der RPA, in der die der Relation (4.5.30a) entsprechende Gleichung

$$(4.5.33) \quad 1 = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta (G^{RPA})^2}{3} (2I_{||} + I_{\perp})$$

lautet, erhalten wir

$$(4.5.34) \quad G^{RPA} = \sqrt{\frac{3\beta^{-1}}{2I_{||} + I_{\perp}}} \sqrt{1 - \frac{\beta^{-1}}{(\beta_c^{RPA})^{-1}}}$$

als Ergebnis für die spontane Magnetisierung. Damit finden wir in beiden Näherungen für $\mathfrak{G}$ in der niedrigsten Ordnung in $T_c - T$ das gleiche Potenzgesetz mit dem kritischen Exponenten $1/2$, ein Resultat, das bereits auch die MFA liefert.

In dem Temperaturverhalten der Nächstnachbarkorrelationen sind allerdings geringe Unterschiede zu den Ergebnissen der RPA zu verzeichnen. Während wir in unserer Näherung ohne numerische Auswertung des Gleichungssystems (4.5.30) nur die Entwicklungen

$$(4.5.34a) \quad \mu = \mu_c - \left(\frac{1}{2} - \mu_c\right) \left(1 - \frac{6(1-2\mu_c)}{7}\right) \beta_c (\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) + o((\beta_c^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

$$(4.5.34b) \quad \eta = \eta_c + \frac{1+4\eta_c}{7} (19 - 24\eta_c) \beta_c (\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) + o((\beta_c^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

für das isotrope Modell angeben können, zeigen die Ergebnisse

$$(4.5.35a) \quad \mu_{||}^{RPA} = \mu_{||c}^{RPA} - \left(\mu_{||c}^{RPA} + \frac{I_{||}}{4(2I_{||} + I_{\perp})}\right) \beta_c^{RPA} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) + o(((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

$$(4.5.35b) \quad \mu_{\perp}^{RPA} = \mu_{\perp c}^{RPA} - \left(\mu_{\perp c}^{RPA} + \frac{I_{\perp}}{4(2I_{||} + I_{\perp})}\right) \beta_c^{RPA} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) + o(((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

$$(4.5.36a) \quad \eta_{||}^{RPA} = \eta_{||c}^{RPA} - \eta_{||c}^{RPA} \sqrt{\frac{3\beta_c^{RPA}}{(2I_{||} + I_{\perp})\beta}} \sqrt{(\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}} + \left(\frac{3}{\beta} + \frac{I_{||}}{2}\right) \frac{\beta_c^{RPA}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) + o(((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})^{3/2})$$

$$(4.5.36b) \quad \eta_{\perp}^{RPA} = \eta_{\perp c}^{RPA} - \eta_{\perp c}^{RPA} \sqrt{\frac{3\beta_c^{RPA}}{(2I_{||} + I_{\perp})\beta}} \sqrt{(\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}} + \left(\frac{3}{\beta} + \frac{I_{\perp}}{2}\right) \frac{\beta_c^{RPA}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) + o(((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})^{3/2})$$

für den allgemeinen anisotropen Ferromagneten in der RPA, daß zwar in beiden Näherungen die Abnahme der transversalen Korrelationen $\mu_{n,\perp}$ und in unserer Approximation die Zunahme der longitudinalen Korrelation η von ihren Werten am Curie-Punkt jeweils proportional $T_c - T$ ist, aber in der RPA erfolgt das Anwachsen von $\eta_{||}$ und $\eta_{\perp}$ mit $(T_c - T)^{1/2}$.

4.5.2.1. Schwach gekoppelte Netzebenen ($I_{\perp} \ll I_{||}$)

Wie bei der Untersuchung des Tieftemperaturverhaltens unseres Modells wenden wir uns bei der gesonderten Betrachtung

der beiden Fälle extremer Anisotropie zunächst wieder den schwach gekoppelten (001)-Netzebenen zu. Für diesen Spezialfall führt uns die Auswertung des Gleichungssystems (4.5.30) in dem 2. Teil des Anhangs 5 auf die transzendenten Bestimmungsgleichungen

$$(4.5.37) \quad \zeta = 2\pi \sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})} \left\{ \ln \frac{I_{||}}{I_{\perp}} + \ln \left[\frac{16\sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}}{G I_{||}} + \frac{32(B-A)}{\pi\beta I_{||}} \right] - 4A \right\}^{-1}$$

$$(4.5.38a) \quad C_{\perp} = 2\pi \sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})} \left\{ \ln \frac{I_{||}}{I_{\perp}} + \ln \frac{16\sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}}{C_{\perp} I_{||}} - 4B \right\}^{-1}$$

für die spontane Magnetisierung und den Renormalisierungsfaktor $C_{\perp}$ und das Ergebnis

$$(4.5.38b) \quad C_{||} = \frac{1}{I_{||}} \sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}$$

für den zweiten Renormalisierungsfaktor, womit wir das allgemeine Temperaturverhalten (4.5.31) bestätigt finden.

Die Ähnlichkeit der beiden Gleichungen für ζ und $C_{\perp}$ erinnert uns daran, daß sich auch für sehr tiefe Temperaturen die Ergebnisse für diese Größen nicht allzusehr unterscheiden, und hier wie dort wird bei hinreichend kleiner Kopplung $I_{\perp}$ ihr Verschwinden bei der Entartung zu Flächengittern durch eine logarithmische Abhängigkeit von den Kopplungskonstanten gemäß

$$(4.5.39) \quad \zeta \approx 2\pi \sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})} \left\{ \ln \frac{I_{||}}{I_{\perp}} \right\}^{-1}, \quad C_{\perp} \approx 2\pi \sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})} \left\{ \ln \frac{I_{||}}{I_{\perp}} \right\}^{-1}$$

hervorgerufen. Ebenso nehmen auch jetzt für $I_{\perp}=0$ die Nächstnachbarkorrelationen die gleichen konstanten Werte

$$(4.5.40) \quad \mu_{||} = \frac{1}{2}, \quad \mu_{\perp} = 0, \quad \eta_{||} = -\frac{1}{4}, \quad \eta_{\perp} = 0$$

an, die hier aus (4.3.12), (4.4.16) und (4.5.37,38) folgen.

An dieser Stelle führt die Bestimmung der Grenzwerte der Korrelationen am Curie-Punkt für $I_{\perp}=0$ in der RPA auf eine interessante Übereinstimmung. Dazu gehen wir von der Gleichung

chung (4.4.17a) aus, die wir mittels (4.4.12) in

$$(4.5.41a) \quad \mu_{n,c}^{RPA} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\beta_c^{RPA}} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_1(k_1, k_2)}{I_{11}E_1(k_1, k_2) + I_{12}E_1(k_3)}$$

umformen, während wir in (4.4.17b) die Integration über k_1 und k_2 mit

$$(4.5.41b) \quad \mu_{1,c}^{RPA} = \frac{1}{4I_{11}\beta_c^{RPA}} \cdot \frac{2}{\pi^2} \int_0^\pi dk_3 \frac{\cos k_3}{1 + \frac{I_{12}}{2I_{11}}(1 - \cos k_3)} K\left(\frac{1}{1 + \frac{I_{12}}{2I_{11}}(1 - \cos k_3)}\right)$$

$K(k)$: vollst. ellipt. Integral 1. Art zum Modul k

als Ergebnis ausführen. Der Beziehung (4.5.41a) kann man den Grenzwert $\lim_{I_1 \rightarrow 0} \mu_{n,c}^{RPA}$ sofort entnehmen, denn da $\lim_{I_1 \rightarrow 0} \beta_c^{RPA} = \infty$ ist, folgt

$$(4.5.42a) \quad \lim_{I_1 \rightarrow 0} \mu_{n,c}^{RPA} = \frac{1}{2}$$

und wegen (4.4.15) ist

$$(4.5.42b) \quad \lim_{I_1 \rightarrow 0} \eta_{n,c}^{RPA} = -\frac{1}{4}.$$

In (4.5.41b) führen wir die Näherung

$$K(k) \approx \ln \frac{4}{k'} \quad \text{für } k \lesssim 1, k'^2 = 1 - k^2$$

durch und erhalten wegen

$$\mu_{1,c}^{RPA} \approx \frac{1}{4I_{11}\beta_c^{RPA}} \cdot \frac{2}{\pi^2} \int_0^\pi dk_3 \cos k_3 \ln \frac{4}{k'} \approx \frac{1}{4I_{11}\beta_c^{RPA}} \cdot \frac{2}{\pi^2} \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\pi dk_3 \cos k_3 \ln(1 - \cos k_3) \right\} \quad \text{für } I_1 \ll$$

den Grenzwert

$$(4.5.42c) \quad \lim_{I_1 \rightarrow 0} \mu_{1,c}^{RPA} = 0$$

und damit auch

$$(4.5.42d) \quad \lim_{I_1 \rightarrow 0} \eta_{1,c}^{RPA} = 0.$$

Im Grenzfall des zweidimensionalen Modells stimmen also die Werte der Nächstnachbarkorrelationen in der RPA für die RPA-

Curie-Temperatur $T=0$ mit den Resultaten für die Tieftemperaturphase in unserer Näherung überein.

4.5.2.2. Schwach gekoppelte Spinketten ($I_{||} \ll I_{\perp}$)

In diesem Spezialfall, mit dem wir die analytische Behandlung der Gleichungen (4.3.13,15) in der Tieftemperaturphase abschließen wollen, liefert uns die asymptotische Untersuchung im 3. Teil des Anhangs 8 die Ergebnisse

$$(4.5.43a) \quad \sigma = \frac{I_{||}\beta^2}{\tilde{I}_1\tilde{I}_2} \sqrt{\frac{2}{\beta}(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}$$

$$(4.5.43b) \quad C_{||} = \frac{I_{||}\beta^2}{\tilde{I}_2} \sqrt{\frac{2}{\beta}(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}$$

$$(4.5.43c) \quad C_{\perp} = \frac{1}{I_{\perp}} \sqrt{\frac{2}{\beta}(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}$$

mit den Konstanten

$$(4.5.44) \quad \tilde{I}_1 = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{1}{\sqrt{1+u}}, \quad \tilde{I}_2 = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \sqrt{1+u}$$

für die spontane Magnetisierung und die Renormalisierungsfaktoren, in denen wir die $(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})^{1/2}$ -Abhängigkeit bereits aufgrund von (4.5.31) erwarten durften.

Genau wie im Tieftemperaturbereich in den Beziehungen (4.5.26) finden wir auch jetzt eine nur sehr gering Abweichung in den Ergebnissen von σ und $C_{||}$, die hier wie dort beide proportional mit der Austauschwechselwirkung $I_{||}$ beim Übergang zu Spinketten verschwinden. Zugleich sorgt diese Abhängigkeit von $I_{||}$ dafür, daß bei einer starken Anisotropie die spontane Magnetisierung unterhalb des Curie-Punktes bei weitem nicht so schnell anwachsen kann wie bei entsprechend vergleichbaren Situationen beim Übergang zu Flächengittern.

Für die Nächstnachbarkorrelationen in der linearen Kette erhalten wir mittels der Ergebnisse (4.5.43) über (4.3.12) und (4.4.16) die konstanten Werte

$$(4.5.45) \quad \mu_{||} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{I}_2}{\tilde{I}_1}\right) = 0.1274\dots, \quad \mu_{\perp} = \frac{1}{2}, \quad \eta_{||} = -\frac{1}{4} \left(1 - \frac{\tilde{I}_2}{\tilde{I}_1}\right) = -0.0637\dots, \quad \eta_{\perp} = -\frac{1}{4},$$

die für $\mu_{\perp}$ und $\eta_{\perp}$ und nach numerischer Bestimmung von $\tilde{I}_1$ und $\tilde{I}_2$ auch für $\mu_{\parallel}$ und $\eta_{\parallel}$ mit den Ergebnissen der Tieftemperaturnäherung übereinstimmen. Von ihnen steht das von Null verschiedene Resultat für $\eta_{\parallel}$ mit dem Verschwinden von G im Widerspruch, wie wir bereits dort ausführten. Daneben weist $\eta_{\parallel}$ genau wie $\mu_{\parallel}$ am Curie-Punkt für $I_{\parallel}=0$ eine Unstetigkeit auf, denn im paramagnetischen Temperaturbereich sind beide Größen gleich Null, wie wir schon gesehen haben.

Auch jetzt wollen wir wieder wie beim Übergang zu Flächengittern die Ergebnisse für die Werte der Korrelationen am Curie-Punkt mit denen der RPA im Grenzfall $I_{\parallel} \rightarrow 0$ vergleichen. Die Einführung der im Anhang 5 in (A5.26) definierten Zustandsdichten in die Gleichung (4.4.17a) liefert letztlich

$$(4.5.46) \quad \mu_{\parallel, c}^{RPA} = - \frac{1}{2\beta_c^{RPA}} \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} dE_2 \frac{K'(E_2) \cdot E_2}{\sqrt{I_{\parallel}(1+E_2)} \sqrt{I_{\perp} + I_{\parallel}(1+E_2)}}$$

und an der Beziehung (4.4.17b) in der Form

$$(4.5.47) \quad \mu_{\perp, c}^{RPA} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\beta_c^{RPA}} \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\perp}(k_3)}{I_{\parallel}E_{\parallel}(k_1, k_2) + I_{\perp}E_{\perp}(k_3)}$$

lesen wir sofort den Grenzwert

$$(4.5.48a) \quad \lim_{I_{\parallel} \rightarrow 0} \mu_{\perp, c}^{RPA} = \frac{1}{2}$$

ab, mit dem wir über (4.4.15)

$$(4.5.48b) \quad \lim_{I_{\parallel} \rightarrow 0} \eta_{\perp, c}^{RPA} = -\frac{1}{4}$$

erhalten. Formen wir die Gleichung (4.4.12) für β_c^{RPA} ebenfalls mittels der Zustandsdichten in

$$(4.5.49) \quad \beta_c^{RPA} = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{I_{\parallel}(1+E_2)} \sqrt{I_{\perp} + I_{\parallel}(1+E_2)}}$$

um und setzen β_c^{RPA} in (4.5.46) ein, so finden wir die Grenzwerte

$$(4.5.50a) \quad \lim_{I_{||} \rightarrow 0} \mu_{||,C}^{RPA} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\int_{-1}^{+1} dE_2 K'(E_2) \sqrt{1+E_2}}{\int_{-1}^{+1} dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1+E_2}}} \right) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{I}_2}{\tilde{I}_1} \right)$$

und über (4.4.15)

$$(4.5.50b) \quad \lim_{I_{||} \rightarrow 0} \eta_{||,C}^{RPA} = -\frac{1}{4} \left(1 - \frac{\tilde{I}_2}{\tilde{I}_1} \right).$$

Also auch beim Übergang zum eindimensionalen Modell stimmen die Werte der Nächstnachbarkorrelationen am Curie-Punkt $T=0$ in der RPA mit den konstanten Werten in der Tieftemperaturphase unserer Näherung überein.

Abgesehen von den beiden Fällen der Entartung in Flächengitter und in Spinketten, haben unsere asymptotischen Untersuchungen unmittelbar unterhalb des Curie-Punktes im Temperaturverlauf der spontanen Magnetisierung in der niedrigsten Ordnung in $T_C - T$ das gleiche Potenzgesetz mit dem kritischen Exponenten $1/2$ ergeben, wie es auch die RPA und die MFA vorhersagen. Die gleiche Temperaturabhängigkeit zeigen auch die beiden Renormalisierungsfaktoren $C_{||}$ und $C_{\perp}$, deren Werte sich genau wie im Bereich sehr tiefer Temperaturen für die extremen Anisotropieverhältnisse $I_{\perp}/I_{||} \ll 1$ bzw. $I_{\perp}/I_{||} \gg 1$ nur sehr wenig von den Resultaten für G unterscheiden. Damit dürfen wir erwarten, daß dieses gleichartige Verhalten in der gesamten Tieftemperaturphase vorliegt.

Bei der Entkopplung unseres Modells zu Flächengittern einerseits und zu Spinketten auf der anderen Seite stimmen die Resultate in beiden Temperaturbereichen ebenfalls für alle untersuchten Größen überein: Die spontane Magnetisierung verschwindet, von der Anregungsenergie überlebt nur der zwei- bzw. der eindimensionale Anteil, die Werte der Nächstnachbarkorrelationen sind von Temperatur und Wechselwirkungskonstanten unabhängig. Dabei verschwindet die spontane Magnetisierung G beim Übergang zu den niederdimensionalen Modellen auch jeweils in der gleichen funktionalen Abhängigkeit von den Kopplungskonstanten $I_{||}$ und $I_{\perp}$. Eine logarithmische Abhängigkeit $\ln \frac{I_{\perp}}{I_{||}}$ beschreibt bei der Entkopplung zu Flä-

chengittern ($I_{\perp} \rightarrow 0$) in den transzendenten Gleichungen für $\mathcal{G}$ den Zusammenbruch der Fernordnung, während $\mathcal{G}$ wegen der linearen Abhängigkeit von $I_{\parallel}$ beim Übergang zu Spinketten ($I_{\parallel} \rightarrow 0$) deutlich stärker gegen Null geht. Im ersten Fall stehen unsere Ergebnisse damit in Einklang mit den Resultaten von MIKESKA, während für $I_{\perp} = 0$ die Ergebnisse der Untersuchungen von MUBAYI und LANGE am zweidimensionalen Modell bestätigt werden.

Zum Abschluß dieses Kapitels wollen wir die bislang zurückgestellte numerische Auswertung der Gleichungssysteme (4.3.13,15) und (4.4.14) vornehmen, um einen lückenlosen Überblick über die Abhängigkeit von spontaner Magnetisierung, Renormalisierungsfaktoren und Nächstnachbarkorrelationen von der Temperatur und den Austauschwechselwirkungen zu gewinnen und unsere bisherigen Teilergebnisse zu bestätigen.

4.6. Die numerischen Lösungen der Gleichungssysteme für die spontane Magnetisierung, die Renormalisierungsfaktoren und die Nächstnachbarkorrelationen

Wie wir schon im Abschnitt 4.3 bemerkten, können wir die transzendenten Gleichungen, aus denen sich die spontane Magnetisierung $\mathcal{G}$ und die Renormalisierungsfaktoren $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ bestimmen, mit Ausnahme der bereits diskutierten Grenzfälle nur numerisch lösen. Hat man $\mathcal{G}$, $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ aus (4.3.13) und (4.3.15) für ein vorgegebenes äußeres Magnetfeld H' und feste Kopplungskonstanten $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ als Funktionen der Temperatur erhalten, so gewinnt man die transversalen Nächstnachbarkorrelationen $\mu_{\parallel} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{\parallel}}^+ \rangle$ und $\mu_{\perp} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{\perp}}^+ \rangle$ über (4.3.12) und die entsprechenden longitudinalen Korrelationen $\eta_{\parallel} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{\parallel}}^z \rangle$ und $\eta_{\perp} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{\perp}}^z \rangle$ über (4.4.16). In der gleichen Weise geht man vor, wenn die Abhängigkeit der angegebenen Größen von dem Verhältnis der beiden Kopplungen $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ bestimmt werden sollen. In der numerischen Auswertung beschränken wir uns auf den Fall, daß kein äußeres Magnetfeld vorhanden ist, und auf das Beispiel eines kubisch-einfachen Gitters mit der intraplanaren Kopplung $I_{\parallel}$ zwischen benachbarten Spins innerhalb derselben (001)-Netzebene und der interplanaren Wechselwirkung $I_{\perp}$. Für die Berechnung der Korrelationen $\mu_{\parallel}$ und $\mu_{\perp}$

im paramagnetischen Temperaturbereich zogen wir die Gleichungen (4.4.14) heran und bestimmten schließlich $\eta_{\parallel}$ und $\eta_{\perp}$ über (4.4.15). Der Diskussion der so gewonnenen Resultate wollen wir noch einige Bemerkungen über die Durchführung der numerischen Auswertung der Gleichungssysteme voranstellen.

4.6.1. Anmerkungen zur numerischen Auswertung

Das in den Gleichungen (4.3.13) und (4.3.15) vorliegende System wurde zunächst umgeformt, um statt dreifacher lediglich zweifache Integrale berechnen zu müssen. Dazu wurden die im Anhang 5 definierten Zustandsdichten des quadratischen Gitters (A5.26a) und der linearen Kette (A5.26b) benutzt, die wir schon bei einer Näherung in der Tieftemperaturphase eingeführt hatten. Messen wir noch die Temperatur in Einheiten der Curie-Temperatur, so gilt es demnach, das System

$$(4.6.1a) \quad \frac{1}{G} = \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dE_1 dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1-E_1^2}} \coth \left[\frac{\beta}{2+\lambda} (2C_{\parallel}(1+E_2) + \lambda C_{\perp}(1+E_1)) \right]$$

$$(4.6.1b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dE_1 dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1-E_1^2}} (1+E_2) \coth \left[\frac{\beta}{2+\lambda} (2C_{\parallel}(1+E_2) + \lambda C_{\perp}(1+E_1)) \right]$$

$$(4.6.1c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dE_1 dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1-E_1^2}} (1+E_1) \coth \left[\frac{\beta}{2+\lambda} (2C_{\parallel}(1+E_2) + \lambda C_{\perp}(1+E_1)) \right]$$

mit $\lambda = \frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}}$ und $K'(x) \equiv K(\sqrt{1-x^2})$ vollst. ell. Int. 1. Art

auszuwerten. Die Integrale hängen zwar alle von den vier Größen β , λ , $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ ab, die aber lediglich in der Kombination

$$x = \frac{2\beta C_{\parallel}}{2+\lambda} \quad \text{und} \quad y = \frac{\lambda\beta C_{\perp}}{2+\lambda}$$

vorkommen.

Daher läßt sich β als Funktion von x und y darstellen, wenn man (4.6.1b) mit x und (4.6.1c) mit y multipliziert und anschließend beide Gleichungen zu

$$(4.6.1d) \quad \beta = \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dE_1 dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1-E_2^2}} [x(1+E_2) + y(1+E_2)] \coth [x(1+E_2) + y(1+E_2)]$$

addiert. Durch Division beider Gleichungen erhält man

$$(4.6.1e) \quad \lambda = \frac{\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dE_1 dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1-E_2^2}} y(1+E_1) \coth [x(1+E_2) + y(1+E_1)]}{\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dE_1 dE_2 \frac{K'(E_2)}{\sqrt{1-E_2^2}} x(1+E_2) \coth [x(1+E_2) + y(1+E_1)]}$$

Bei der Berechnung der Größen $\mathfrak{G}$, $C_{||}$ und $C_{\perp}$ für ein festes Verhältnis λ der Kopplungen $I_{\perp}$ und $I_{||}$ bestimmten wir zunächst durch Iteration Wertepaare (x,y) , die nach Einsetzen in (4.6.1e) den vorgegebenen Wert von λ bis auf eine bestimmte maximale Abweichung lieferte. Mit diesen Wertepaaren (x,y) wurden dann $\mathfrak{G}$, $C_{||}$ und $C_{\perp}$ nach (4.6.1a-c) berechnet, und die Korrelationen ergaben sich anschließend in der oben angegebenen Weise. Die Berechnung der Größen bei konstanter Temperatur in Abhängigkeit von λ erfolgte entsprechend, indem zunächst Wertepaare (x,y) bestimmt wurden, die (4.6.1d) erfüllten. Die Berechnung der Korrelationen im paramagnetischen Temperaturbereich erforderte weniger Aufwand, denn nach Einführung der Zustandsdichten in den Gleichungen (4.4.14) läßt sich eine der beiden Integrationen analytisch ausführen; im übrigen wird wie in der Tieftemperaturphase vorgegangen.

4.6.2. Die spontane Magnetisierung

Die relative spontane Magnetisierung $\mathfrak{G}$ des Modells (2.2) ist als Funktion der reduzierten Temperatur β^{-1}/β_c^{-1} mit dem Verhältnis λ der Austauschwechselwirkungen $I_{\perp}$ und $I_{||}$ als Parameter für einige Werte $\lambda < 1$ in Abb. 8 (Seite 81) und für $\lambda > 1$ in Abb. 9 (Seite 82) wiedergegeben. Als Funktionen von λ mit der Temperatur als Parameter sind die Resultate für $\mathfrak{G}$ in Abb. 10 (Seite 83) dargestellt.

In den Abbildungen 8 und 9 läßt sich sehr gut das Zusammenbrechen der Fernordnung bei wachsender Anisotropie in den Kopplungskonstanten $I_{||}$ und $I_{\perp}$ verfolgen, das zunächst zu einer stärkeren Abnahme der Werte von $\mathfrak{G}$ im mittleren Temperaturbereich und zur Ausbildung von Wendepunkten in der Nähe des

Nullpunktes und der Curie-Temperatur führt. Dieser Effekt verschärft sich mit zunehmender Anisotropie immer mehr, bis schließlich in den beiden Fällen der Entartung zu einem zwei- bzw. zu einem eindimensionalen Modell für $T \neq 0$ eine Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung vorliegt - ein Ergebnis, das für das Flächengitter bereits MUBAYI und LANGE erhielten und das für die Spinkette aus unseren Betrachtungen im Abschnitt 4.5. für den Grenzfall $I_{\parallel} \rightarrow 0$ plausibel wird. Dabei fällt in Einklang mit den Ergebnissen der asymptotischen Untersuchungen die Abnahme von Θ bei der Entwicklung zum eindimensionalen Modell wesentlich stärker aus als beim Übergang zum Flächengitter; zu vergleichen sind jeweils die Kurven zu den Parametern λ und $1/\lambda$, weil in beiden Fällen eine gleich große Abweichung vom isotropen Modell vorliegt. Dieser Effekt würde bei einer Darstellung in absoluten Temperatureinheiten noch stärker hervortreten, denn die relative Abweichung der Curie-Temperatur von ihrem Wert im isotropen dreidimensionalen Modell beim Übergang zur linearen Kette als Funktion von $\lambda^{-1} = I_{\parallel}/I_{\perp}$ ist doppelt so groß wie beim Übergang zum Flächengitter als Funktion von $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel}$:

$$\frac{T_c(\lambda=1) - T_c(\lambda^{-1})}{T_c(\lambda=1)} = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{\lambda}\right) \quad \text{für} \quad \lambda \geq 1$$

$$\frac{T_c(\lambda=1) - T_c(\lambda)}{T_c(\lambda=1)} = \frac{1}{3} (1 - \lambda) \quad \text{für} \quad \lambda \leq 1$$

Damit können wir jetzt Aussagen über das Verhalten der spontanen Magnetisierung übernehmen, die wir im 3. Kapitel nur für deren obere Schranke machen konnten. Es bedarf also nur einer geringen interplanaren Kopplung, um eine nicht sehr stark vom isotropen dreidimensionalen Fall abweichende Temperaturabhängigkeit zu erzeugen, während dagegen zum Beispiel aus der Kurve für $\lambda=100$ - ein Parameter, der ein Modell schwach gekoppelter Spinketten beschreibt - deutlich hervorgeht, daß Θ fast in einer Hälfte des Temperaturbereichs unterhalb des Curie-Punktes nur wenig über Null hinausgehende Werte annimmt.

Weiterhin finden wir die übrigen Resultate der asymptoti-

schen Untersuchungen bestätigt: Für sehr tiefe Temperaturen sehen wir, wie sich die $T^{3/2}$ -Gesetzmäßigkeit in der Abnahme vom Sättigungswert bei $T=0$ im isotropen und in den schwach anisotropen Modellen in eine lineare Temperaturabhängigkeit verwandelt, während unterhalb der Curie-Temperatur das $(T_c - T)^{1/2}$ -Potenzgesetz mit Ausnahme der Kurven für die quasi-eindimensionalen Modelle zu erkennen ist, in denen bereits die schwache Kopplung $I_{||}$ ein schnelles Anwachsen der spontanen Magnetisierung verhindert.

Um einen Vergleich mit den Ergebnissen in der RPA und in der MFA vornehmen zu können - mit beiden Näherungen finden sich einige Übereinstimmungen - sind in den Abb. 11 bis 13 (Seite 84-86) die Magnetisierungskurven für den isotropen Fall $\lambda=1$ und für die beiden stark anisotropen Modelle mit $\lambda=10^{-3}$ und $\lambda=100$ in allen drei Näherungen zusammengestellt worden. Weiterhin ist in den Darstellungen die obere Schranke der spontanen Magnetisierung angegeben, die wir mittels der Beziehungen (3.2.18), (3.2.20) und (3.3.1) für dieses Beispiel berechnet haben.

Wir sehen hier eine Bestätigung unserer asymptotischen Untersuchungen, in denen wir bei sehr tiefen Temperaturen nur sehr geringe Unterschiede zu den Ergebnissen der RPA feststellen konnten. Ein nicht allzustarkes Abweichen von den Resultaten der MFA hingegen können wir neben der Übereinstimmung der Curie-Temperatur lediglich unmittelbar unterhalb der Curie-Temperatur für das isotrope Modell bemerken, in dem unsere Näherung eine Verbindung zwischen den Resultaten in der MFA und in der RPA in der Weise herstellt, daß erstere für tiefe Temperaturen und letztere unterhalb des Curie-Punktes nahezu reproduziert werden. Daß der zweite Teil dieser Aussage bei wachsender Anisotropie nicht mehr aufrechterhalten werden kann, ist schon allein deswegen plausibel, weil die MFA auch in ein- und in zweidimensionalen Heisenberg-Ferromagneten unrealistischerweise das Vorhandensein einer spontanen Magnetisierung vorhersagt. Deshalb müssen natürlich auch die Resultate der MFA bei zunehmender Anisotropie bald die Werte der oberen Schranke von σ übersteigen, zumal schon im isotropen Modell in einem Teil des Temperaturbereichs die beiden Kurven nahe beieinanderliegen.

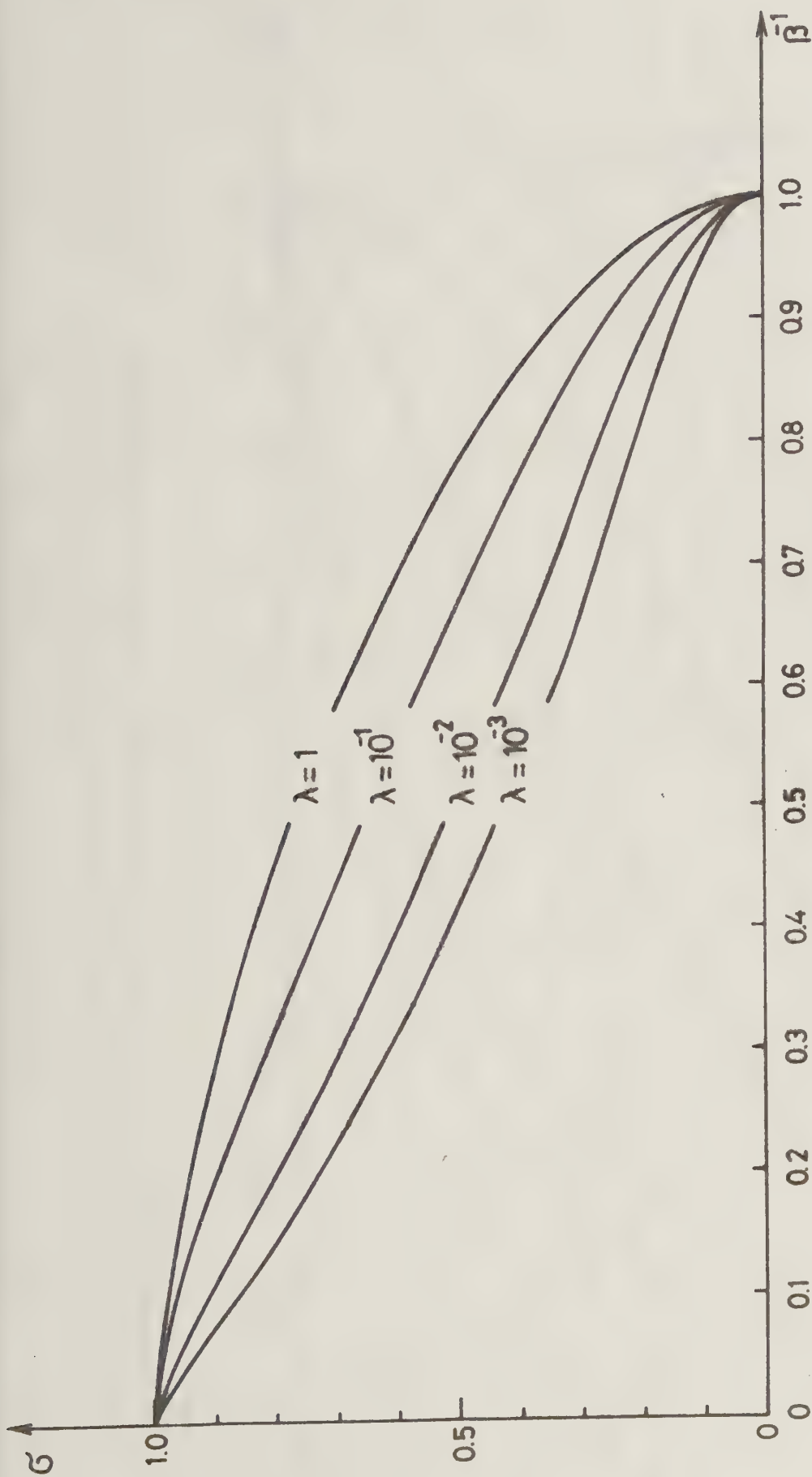


Abb. 8

Die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung σ für Anisotropieparameter $\lambda = I_a/I_b \leq 1$. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_b/(2+\lambda)$.

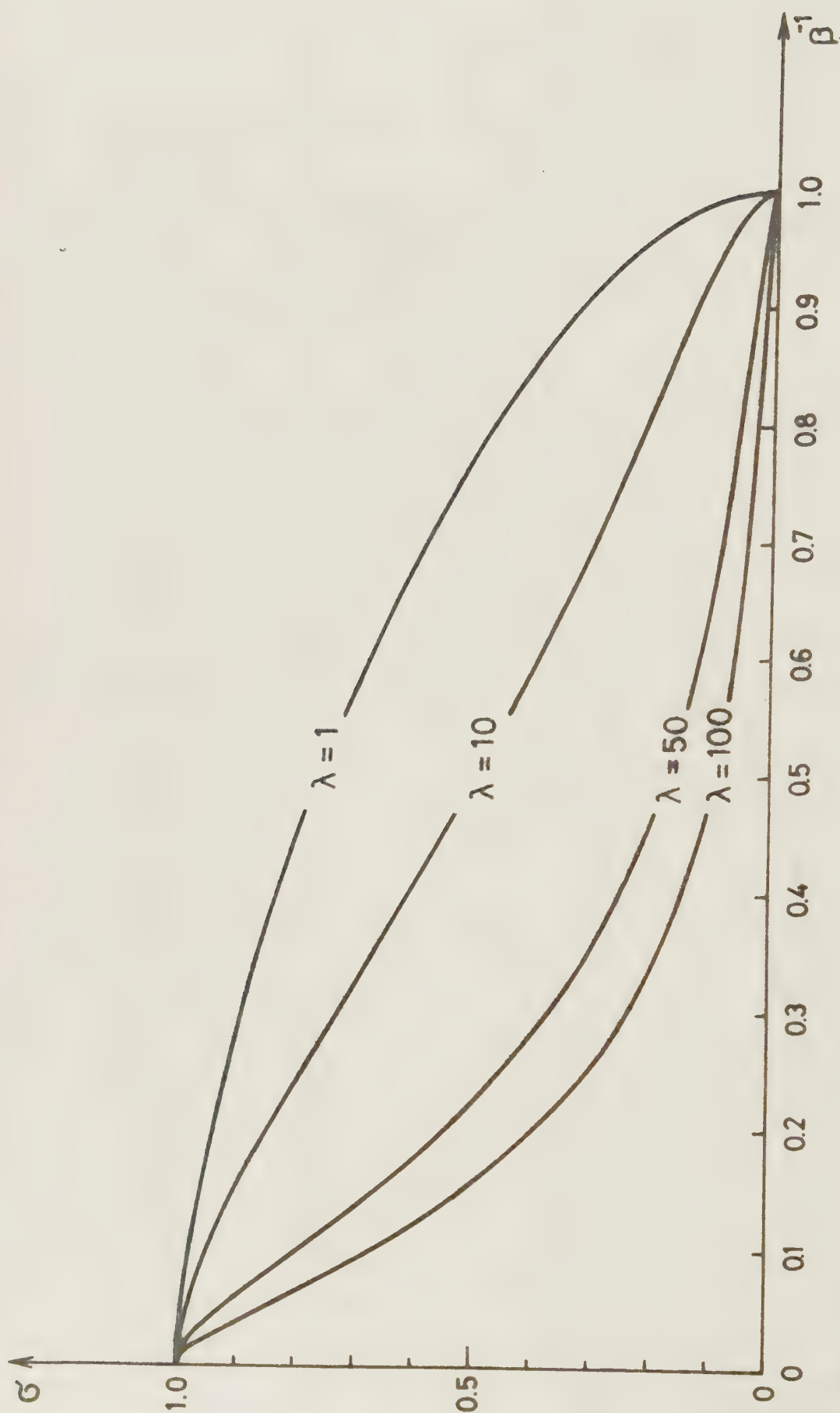


Abb. 9

Die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung σ für Anisotropieparameter $\lambda = I_a/I_0 \geq 1$. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_a(\frac{2}{\lambda} + 1)$.

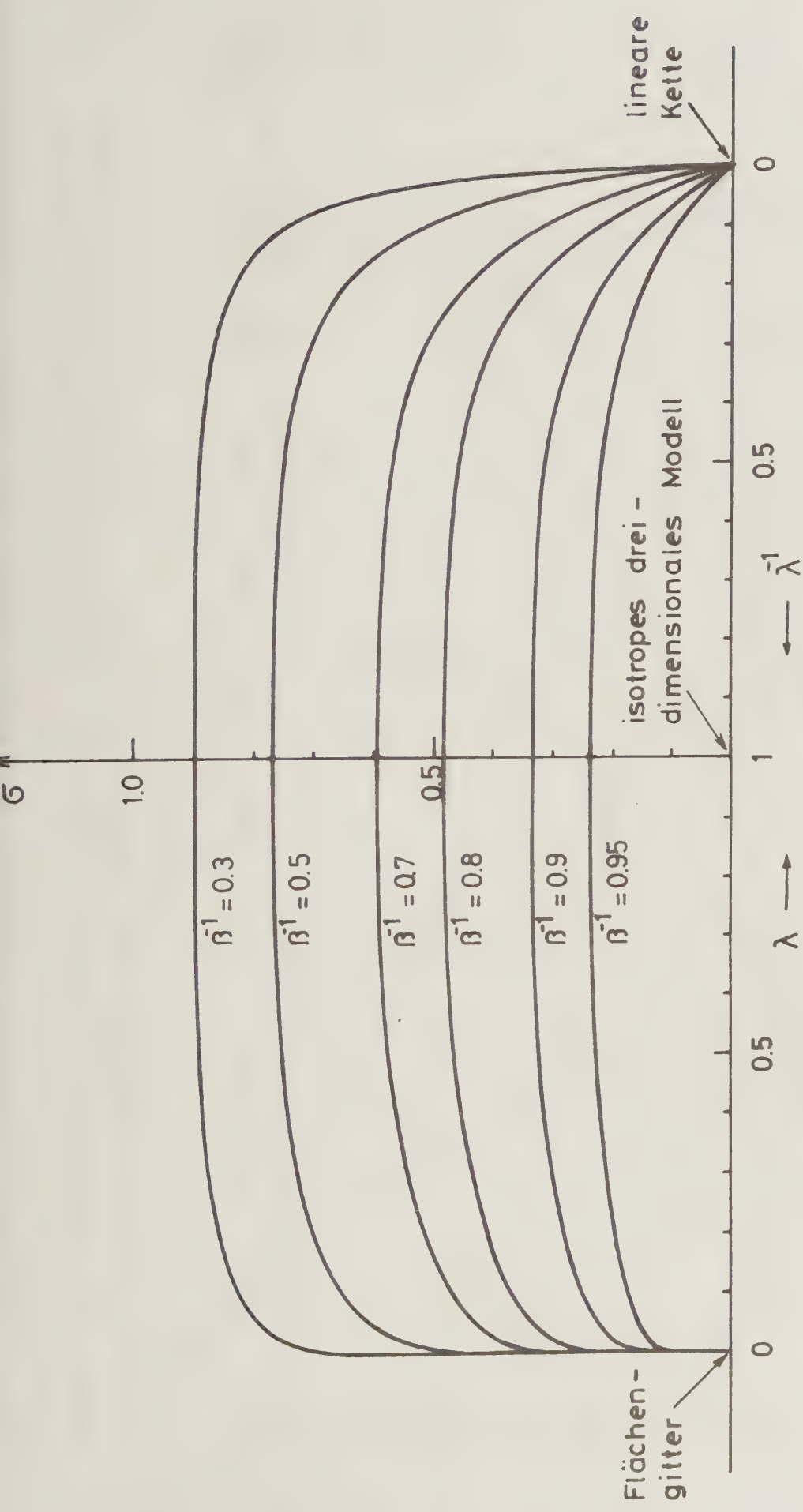


Abb. 10

Die Abhängigkeit der spontanen Magnetisierung σ vom Anisotropieparameter $\lambda = I_z/I_x$.
Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_c^{-1}(\lambda)$.

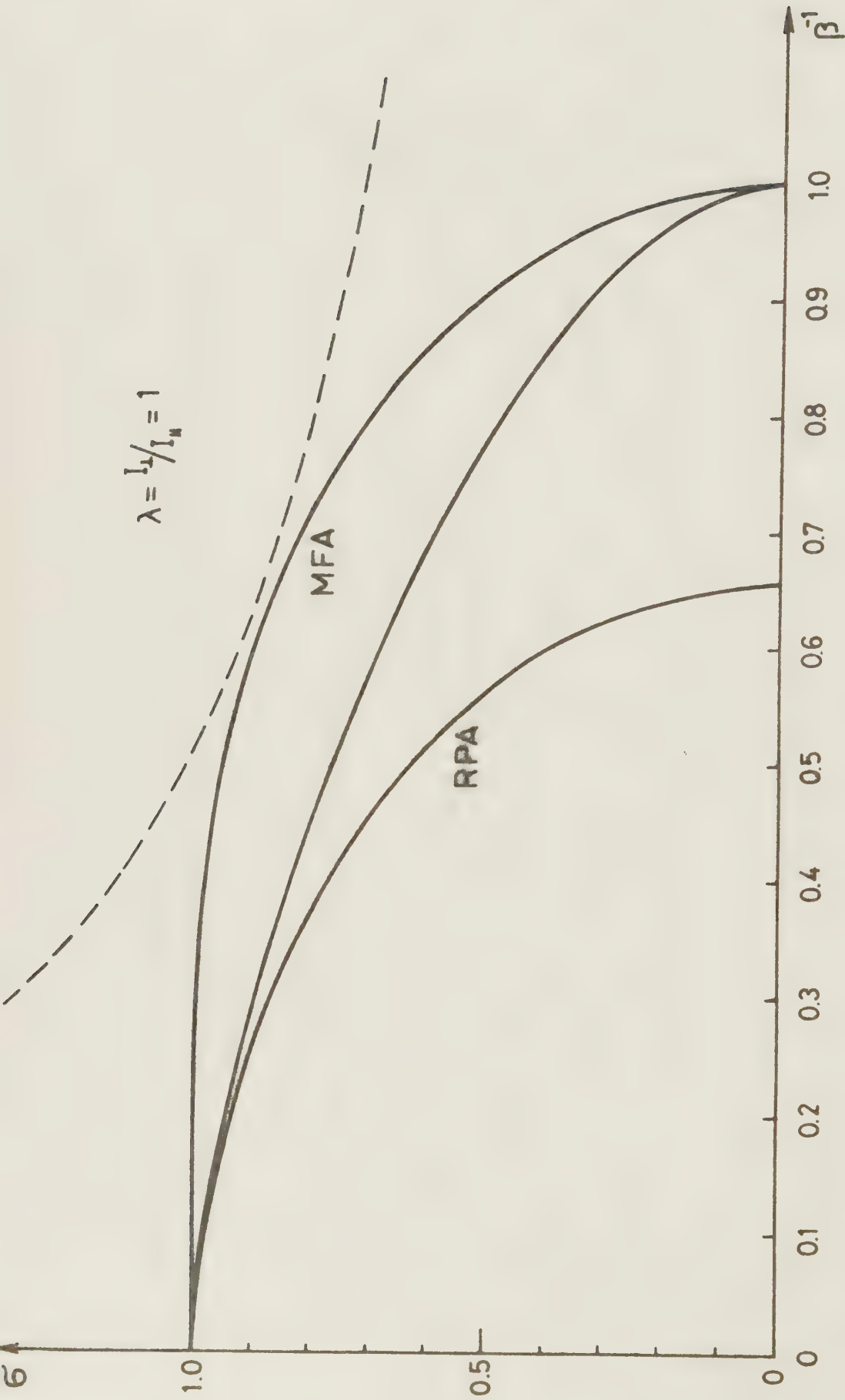


Abb. 11

Vergleich der Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung σ mit den Resultaten der MFA und der RPA für das isotrope Modell. Die gestrichelte Kurve stellt die im Kapitel 3 bestimmte obere Schranke von σ dar.

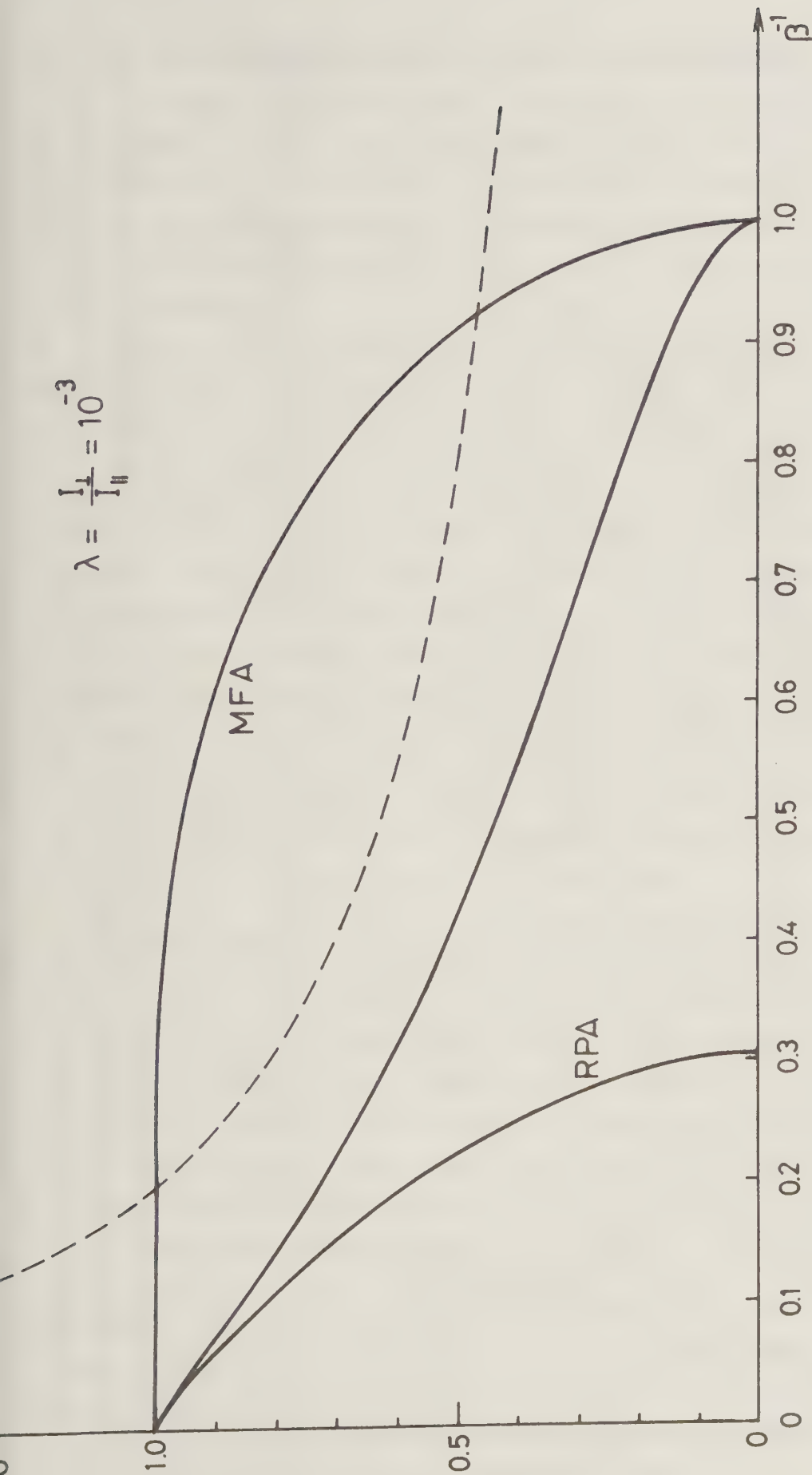


Abb. 12

Vergleich der Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung σ mit den Resultaten der MFA und der RPA für das Modell schwach gekoppelter Netzebenen mit dem Verhältnis $\lambda = I_I/I_{II} = 10^{-3}$ zwischen interplanarer und intraplanarer Wechselwirkung I_I bzw. I_{II} . Die gestrichelte Kurve stellt die im Kapitel 3 bestimmte obere Schranke von σ dar.

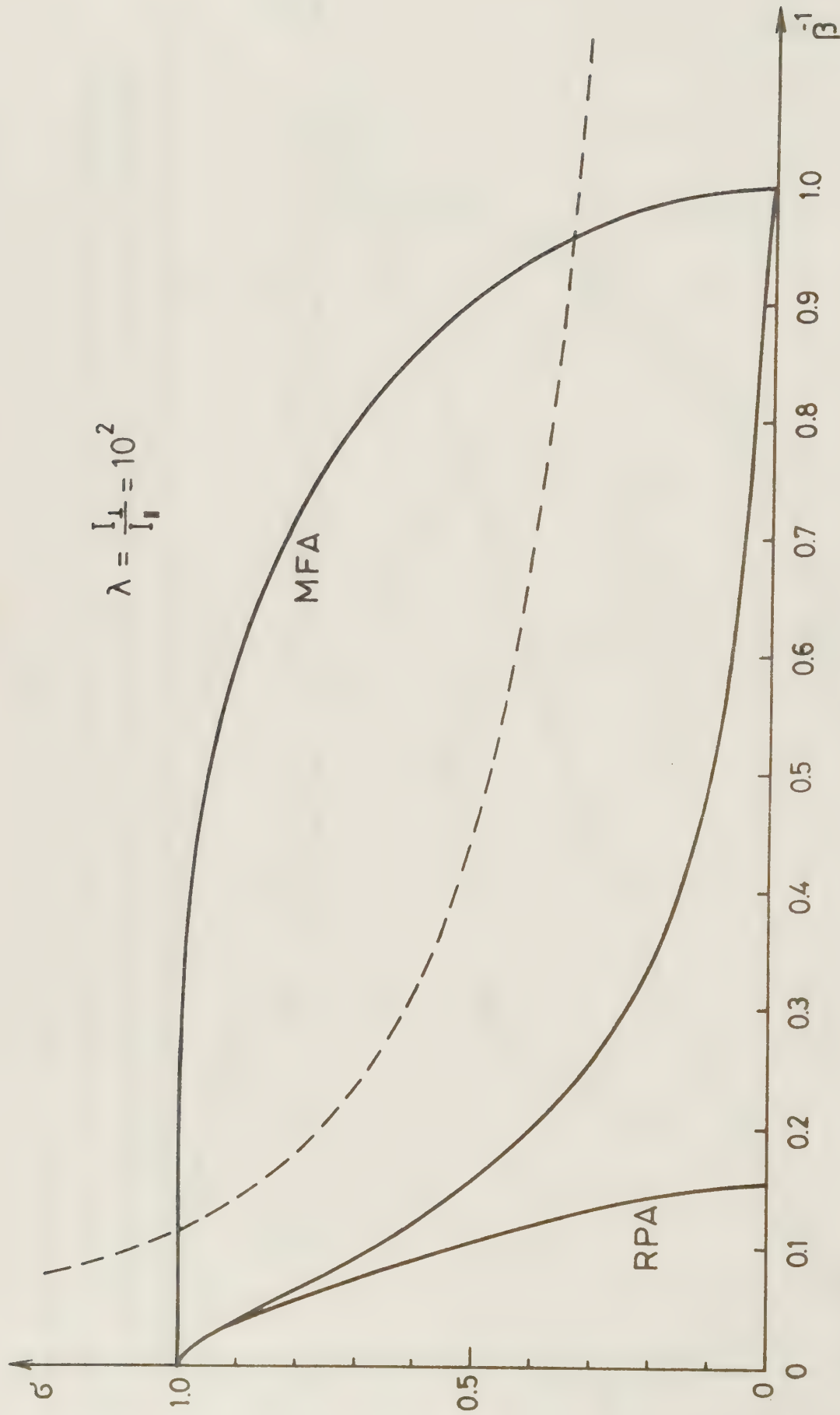


Abb. 13

Vergleich der Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung σ mit den Resultaten der MFA und der RPA für das Modell schwach gekoppelter Spinketten mit dem Verhältnis $\lambda = I_A/I_B = 100$ zwischen interplanarer und intraplanarer Wechselwirkung I_A bzw. I_B . Die gestrichelte Kurve stellt die im Kapitel 3 bestimmte obere Schranke von σ dar.

4.6.3. Die Renormalisierung der Spinwellenenergie

Die Temperaturabhängigkeit der beiden Faktoren $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$, mit denen die ein- und zweidimensionalen Anteile der Spinwellenenergie in der von uns verwendeten Näherung renormalisiert werden, ist für den Anisotropieparameter $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel} \leq 1$ ($C_{\perp}$) in Abb. 14 (Seite 88) und für $\lambda \geq 1$ ($C_{\parallel}$) in Abb. 15 (Seite 89) wiedergegeben.

Wie wir bereits aufgrund der asymptotischen Untersuchungen an den stark anisotropen Modellen vermuteten, weisen diese Kurven einen den Ergebnissen der spontanen Magnetisierung ähnlichen Verlauf mit einem Einbruch bei der Entwicklung zu den niederdimensionalen Modellen auf. Zum Vergleich sind deshalb in Abb. 16 (Seite 90) noch einmal die entsprechenden Kurven von ζ und $C_{\perp}$ bzw. $C_{\parallel}$ zusammengefaßt worden. In dieser Darstellung kommt auch deutlich in den Kurven für den isotropen Ferromagneten die unterschiedliche Abnahme dieser Größen von ihren Werten bei $T=0$ zum Ausdruck, die, wie wir gesehen haben, mit einer $T^{3/2}$ - und einer $T^{5/2}$ -Gesetzmäßigkeit für die spontane Magnetisierung bzw. den Renormalisierungsfaktor erfolgt. Ferner wird wie bei den Ergebnissen für ζ der Übergang zu einer der Temperatur proportionalen Abnahme in stark anisotropen Modellen bestätigt.

Andererseits zeigt sich im Temperaturverlauf der Größen $C_{\perp}$ für $\lambda \geq 1$ und $C_{\parallel}$ für $\lambda \leq 1$ ein nur sehr geringer Einfluß der Wechselwirkungskonstanten $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$, wie wir der Abb. 17 (Seite 91) entnehmen können. Daß die Änderung im Tieftemperaturverhalten nicht deutlicher zu bemerken ist, liegt an der Wiedergabe in Einheiten der reduzierten Temperatur. Wäre die Abhängigkeit von $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ in absoluten Temperatureinheiten wiedergegeben worden, würde die Entwicklung von der $T^{5/2}$ -Gesetzmäßigkeit im isotropen Modell zu dem T^2 - und dem $T^{3/2}$ -Verhalten für $C_{\parallel}$ im Flächengitter bzw. für $C_{\perp}$ in der linearen Kette stärker hervortreten. Im Falle der Entkopplung zu zwei- bzw. eindimensionalen Systemen wird also auch nur eine zwei- bzw. eindimensionale Spinwellenenergie renormalisiert. Im Unterschied zur RPA finden wir damit auch in den entarteten Fällen des Flächengitters und der linearen Kette von Null verschiedene Anregungsenergien.

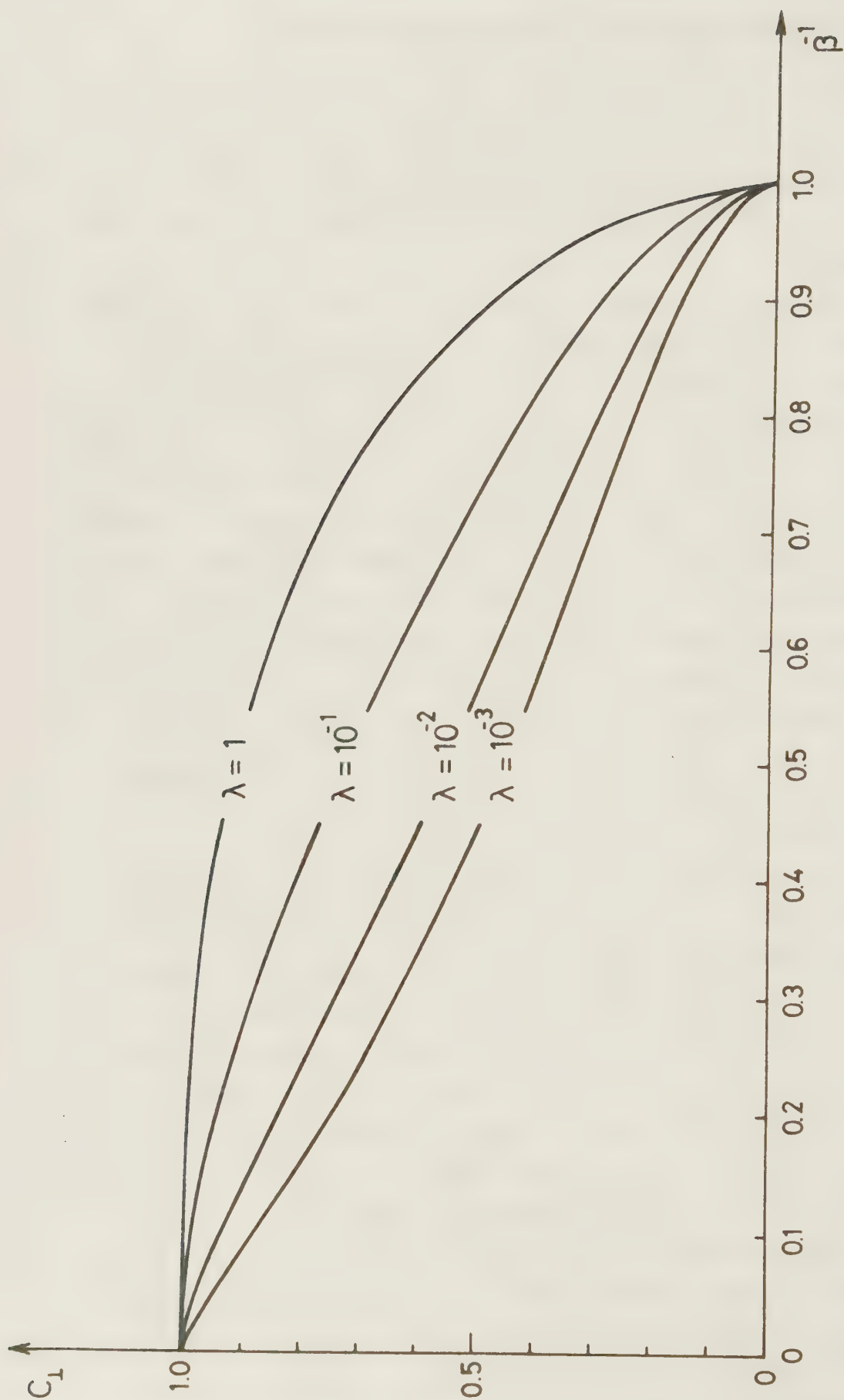


Abb. 14

Die Temperaturabhängigkeit des Renormalisierungsfaktors C_L für Anisotropieparameter $\lambda \leq 1$.
Die Temperatur ist in Einheiten der jeweiligen Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_0 (2 + \lambda)$ angegeben.

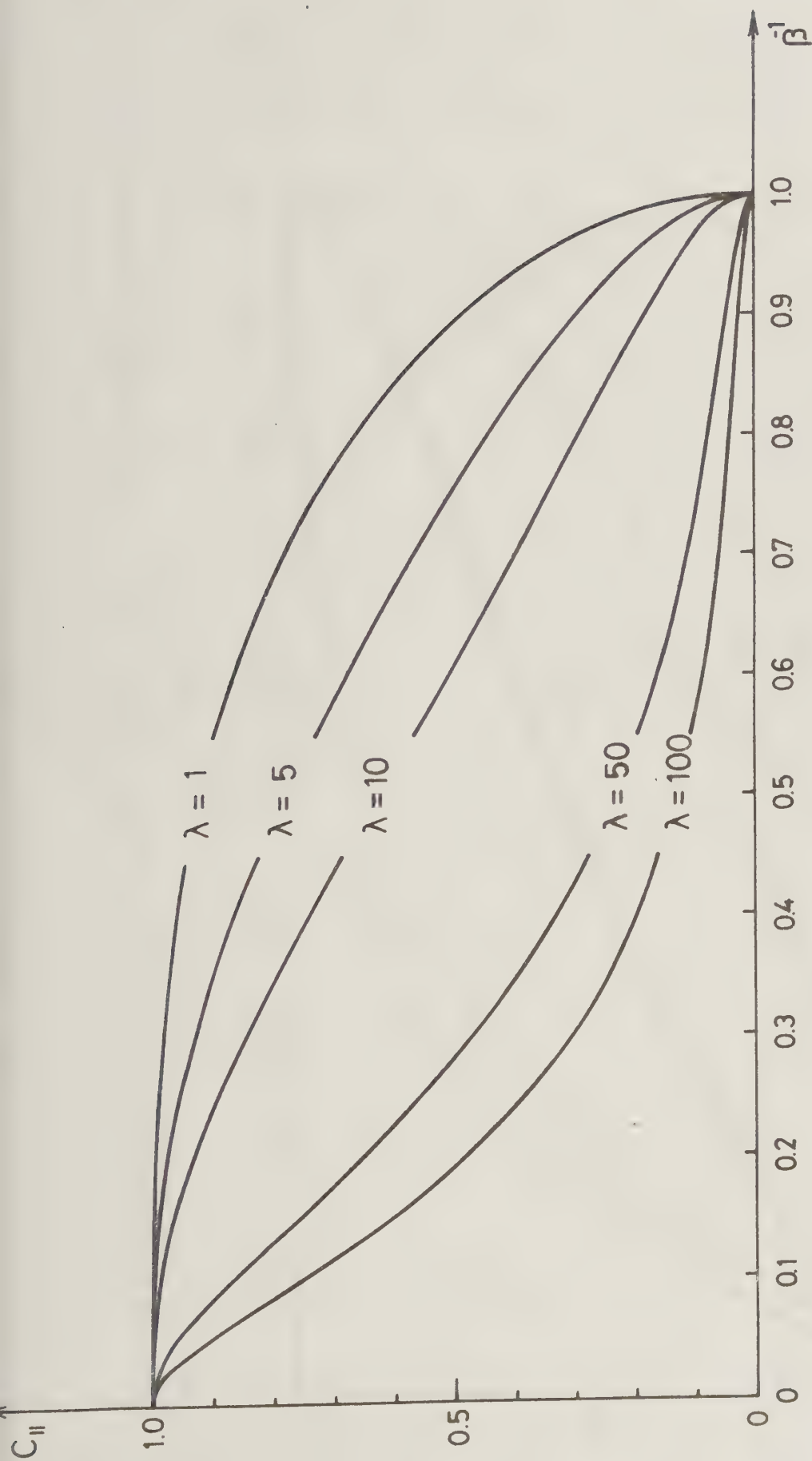


Abb. 15

Die Temperaturabhängigkeit des Renormalisierungsfaktors $C_{||}$ für Anisotropieparameter $\lambda \geq 1$. Die Temperatur ist in Einheiten der jeweiligen Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_A (\frac{2}{\lambda} + 1)$ angegeben.

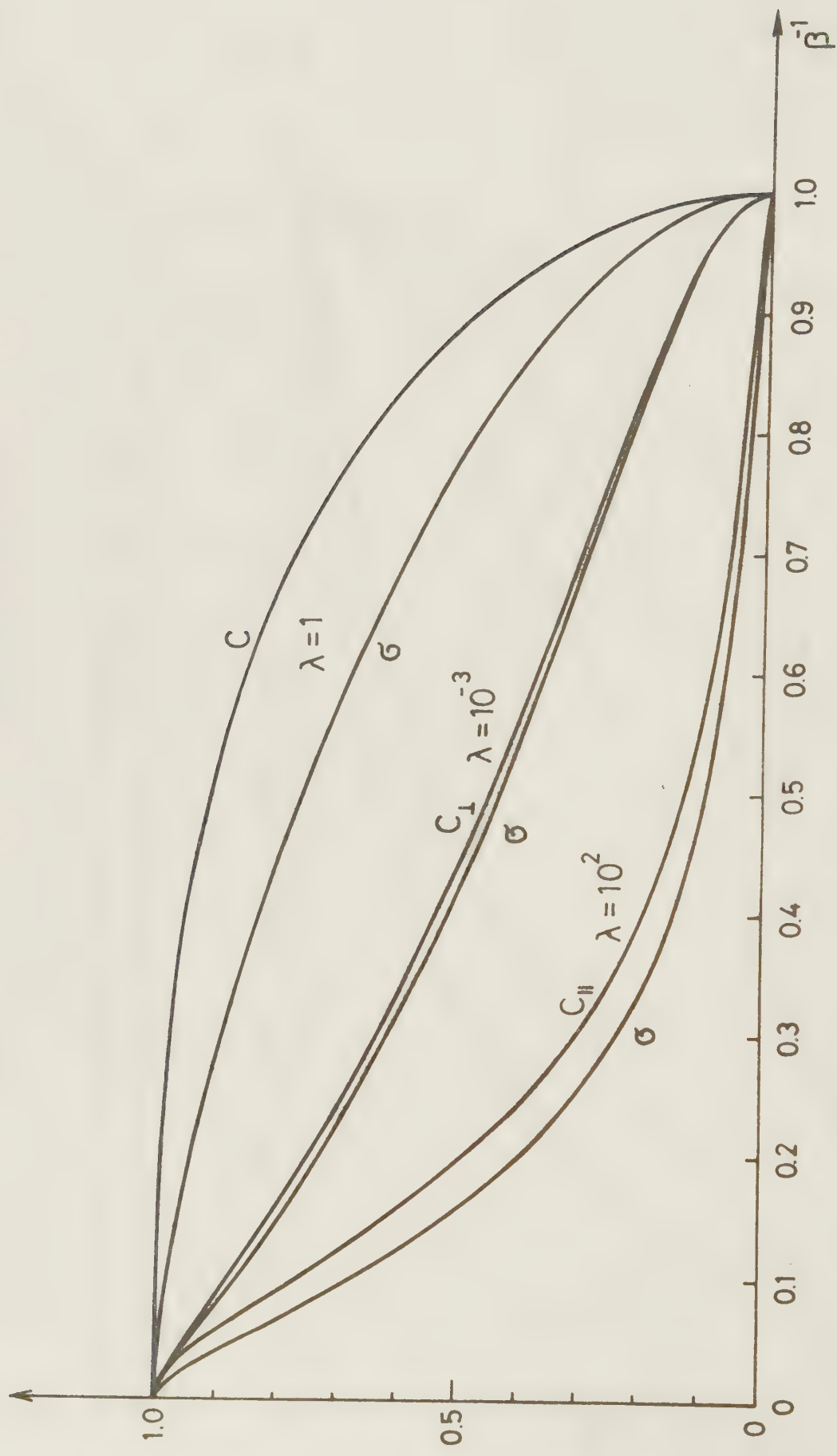


Abb. 16

Vergleich der Temperaturabhängigkeit von spontaner Magnetisierung σ und Renormalisierungsfaktor $C_{\parallel}$.

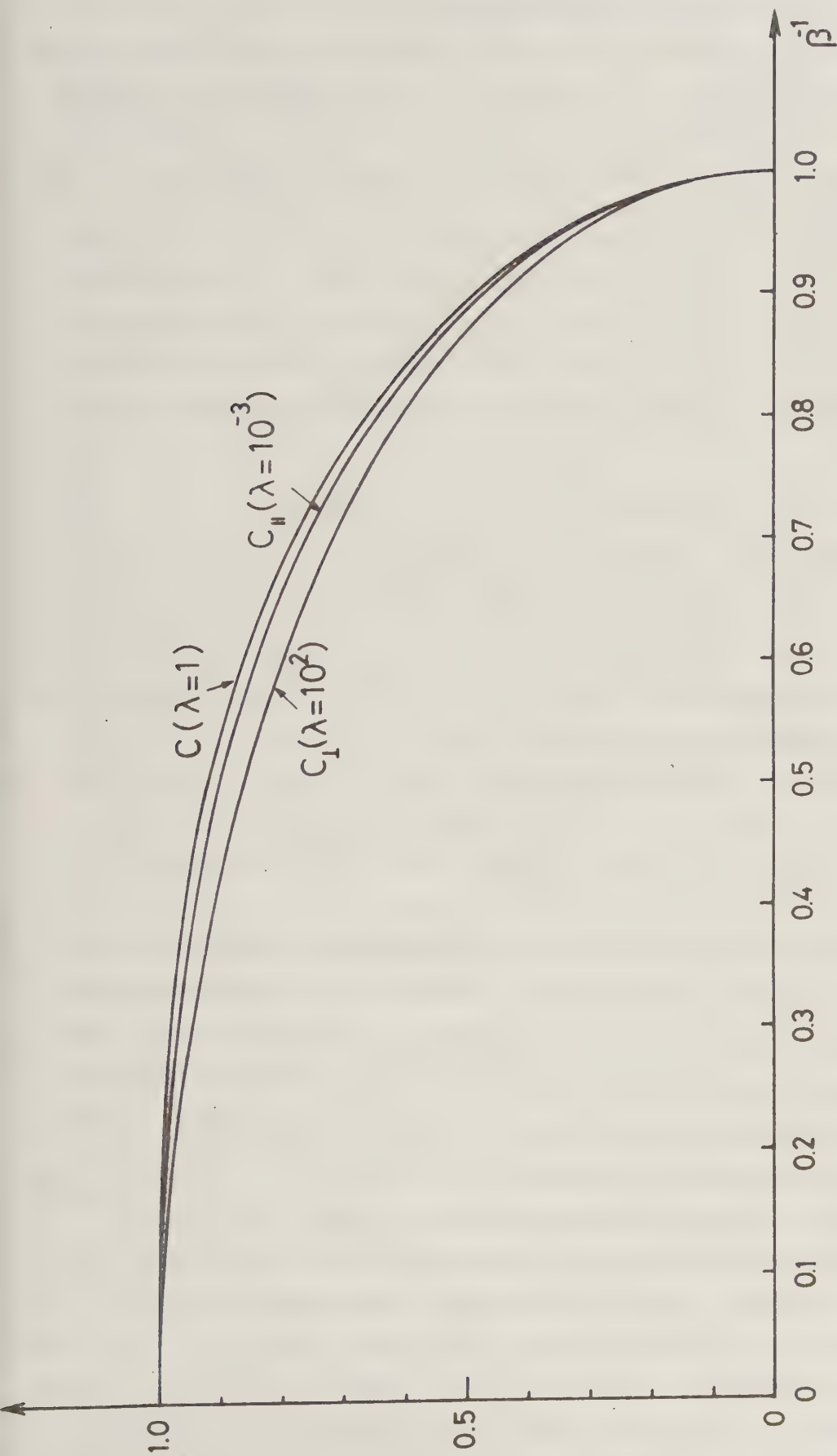


Abb. 17

Die geringe Veränderlichkeit in der Temperaturabhängigkeit der Renormalisierungsfaktoren $C_{||}$ für $\lambda \leq 1$ und $C_{\perp}$ für $\lambda \geq 1$ bei Variation des Anisotropieparameters $\lambda = I_{\perp}/I_{||}$. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1}(\lambda)$.

4.6.4. Die Nächstnachbarkorrelationen

Abschließend wenden wir uns den Ergebnissen für die Nächstnachbarkorrelationen $\mu_{n,\perp} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{n,\perp}}^+ \rangle$ und $\eta_{n,\perp} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{n,\perp}}^z \rangle$ zu. Deren Temperaturabhängigkeit sowohl in der geordneten als auch in der paramagnetischen Phase ist für einige Verhältnisse $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel}$ der Austauschwechselwirkungen $I_{\perp}$ und $I_{\parallel}$ in den Abb. 18 bis 23 (Seite 95-100) wiedergegeben. Darüberhinaus sind in den Abb. 24 bis 26 (Seite 101-103) die Ergebnisse für alle Nächstnachbarkorrelationen eines festen Kopplungsverhältnisses für die Beispiele $\lambda=1$, $\lambda=10^{-3}$ und $\lambda=100$ mit den Resultaten der RPA zusammengefaßt, um einen Vergleich beider Näherungen zu erleichtern.

Betrachten wir zunächst das isotrope Modell mit $\lambda = 1$. Bei tiefen Temperaturen wird das $T^{3/2}$ -Verhalten sehr gut bestätigt, und auch die Übereinstimmung der Resultate beider Näherungen in diesem Bereich können wir der Abb. 24 entnehmen, ebenso die Gleichheit der Werte der Korrelationen für die jeweilige Curie-Temperatur. Allerdings ist der Temperaturbereich in der geordneten Phase unterhalb des Curie-Punktes, in dem die longitudinale Korrelation $\eta = \langle s_n^z s_{n+\delta}^z \rangle$ negative Werte annimmt und die Näherung in dieser Hinsicht zu physikalisch unbefriedigenden Resultaten führt, in der RPA sowohl absolut als auch relativ gesehen kleiner.

Nimmt jetzt die Stärke der Wechselwirkung $I_{\perp}$ ab, so erhalten wir bei gleicher reduzierter Temperatur höhere Werte der transversalen Korrelation $\mu_n = \langle s_n^- s_{n+\delta_{n,\perp}}^+ \rangle$ zwischen Spins, die über die konstant bleibende intraplanare Wechselwirkung $I_{\parallel}$ miteinander gekoppelt sind, während die Werte von $\mu_{\perp} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{\perp}}^+ \rangle$ abnehmen. Letzteres sollte auch von einer vernünftigen Näherung erwartet werden. In der Abb. 18 ist klar zu erkennen, daß die Werte von $\mu_{\perp}$ mit der Abnahme von $I_{\perp}$ gegen Null gehen, während andererseits auch aus der Kurve für $\lambda=10^{-3}$ noch nicht deutlich hervorgeht, daß μ_n für $I_{\perp} \rightarrow 0$ gegen den Wert $1/2$ strebt. Aber wir haben ja auch schon an der Kurve für die spontane Magnetisierung σ im Fall $\lambda=10^{-3}$ gesehen, daß für dieses Beispiel eines stark anisotropen Ferromagneten noch kaum ein Einfluß der niederen Dimension zu bemerken ist. Deutlich kommt aber die veränderte Temperaturabhängigkeit in der Nähe des

Nullpunktes zum Ausdruck, wenn die intraplanare die interplanare Kopplung stark übertrifft. Den Übergang von einem $T^{3/2}$ -Verhalten zu der in Abschnitt 4.5.1.1. erhaltenen linearen Abhängigkeit finden wir gut bestätigt. Dieselbe Entwicklung nehmen wir genauso bei den longitudinalen Korrelationen (Abb. 19 und 20) wahr, die bei wachsender Anisotropie bei tiefen Temperaturen in guter Übereinstimmung mit dem Temperaturverhalten der spontanen Magnetisierung stärker abfallen. Während die Werte von $\eta_{\parallel} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{\parallel}}^z \rangle$ in der gesamten Tieftemperaturphase mit der Kopplung $I_{\parallel}$ zurückgehen, finden wir für die Korrelation $\eta_{\perp} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{\perp}}^z \rangle$ immer einen Bereich unterhalb der Curie-Temperatur, in dem $\eta_{\perp}$ bei fallendem λ ansteigt. Dieses Verhalten verwundert aber nicht, da wir gesehen haben, daß $\lim_{I_{\parallel} \rightarrow 0} \eta_{\perp} = 0$ gilt und η für $\lambda=1$ unterhalb β_c^{-1} negative Werte annimmt. Für die Entwicklung der Ergebnisse für $\eta_{\parallel}$ und $\eta_{\perp}$ zu den Grenzwerten im Flächengitter gelten die obigen Bemerkungen zu $\mu_{\parallel}$ und $\mu_{\perp}$ hier entsprechend. Wir wollen noch darauf hinweisen, daß der Bereich unterhalb β_c^{-1} , in dem $\eta_{\parallel}$ negative Werte annimmt, mit zunehmender Anisotropie immer größer wird. Damit umfaßt die unzulängliche Beschreibung unseres Modells durch das Näherungsverfahren, die in der Vorhersage von negativen Werten von $\eta_{\parallel}$ in einer ferromagnetischen Phase besteht, ein immer größeres Temperaturintervall, bis schließlich im Flächengitter im gesamten Bereich unterhalb β_c^{-1} die Größe $\eta_{\parallel}$ den Wert $-1/4$ erreicht. Wie wir durch einen Vergleich der Abb. 24 und 25 bemerken, werden die Werte von $\eta_{\parallel}$ unterhalb der Curie-Temperatur auch in der RPA immer stärker negativ, aber gleichzeitig vergrößert sich der Bereich negativer Werte von $\eta_{\parallel}$ wegen der schnelleren Abnahme von $(\beta_c^{RPA})^{-1}$ im Vergleich zu β_c^{-1} hier kaum. Aber dennoch müssen wir wegen der immer stärker ausgeprägten negativen Spitze von $\eta_{\parallel}$ am Curie-Punkt feststellen, daß in diesem Temperaturbereich auch in der RPA die Beschreibung unseres Modells bei einer Abnahme der Kopplung $I_{\parallel}$ immer schlechter wird.

Betrachten wir jetzt den Übergang vom isotropen dreidimensionalen Fall zu einem Modell schwach gekoppelter Spinketten, indem wir die Wechselwirkung $I_{\parallel}$ verringern, so gelten für die Korrelationen $\mu_{\perp}$ und $\eta_{\perp}$ (Abb. 21 bis 23) die gleichen Bemerkungen wie im Fall $I_{\perp} \ll I_{\parallel}$ für $\mu_{\parallel}$ und $\eta_{\parallel}$, nur daß bei

einer vergleichbaren Anisotropie die Entwicklung zu den Grenzwerten bei $I_{\parallel}=0$ wesentlich deutlicher zu erkennen ist. Auch der Übergang zu den in den Näherungen gefundenen nichtverschwindenden Grenzwerten von $\mu_{\parallel}$ und $\eta_{\parallel}$ bei $I_{\parallel}=0$ geht aus den Darstellungen eindrucksvoll hervor. Schon für $\lambda=100$ werden diese in dem überwiegenden Teil der Tieftemperaturphase nahezu erreicht, und die Entwicklung zu Stufenfunktionen ist bei diesen Korrelationen deutlich zu erkennen. Entsprechend vergrößert sich der Bereich negativer Werte von $\eta_{\parallel}$ unterhalb β_c^{-1} jetzt auch schneller als im Fall $I_{\perp} \neq I_{\parallel}$, und verbunden damit verstärkt sich der Nachteil unserer Näherung, unterhalb des Curie-Punktes das Verhalten dieser Korrelationen vernünftig zu beschreiben.

Somit werden wir auch die Ergebnisse für die Nächstnachbar-korrelationen gebührend zu einer kritischen Beurteilung des von uns verwendeten Näherungsverfahrens in der Entkopplung der Greenschen Funktionen heranziehen, die in dem jetzt folgenden abschließenden Kapitel dieser Arbeit enthalten sein wird.

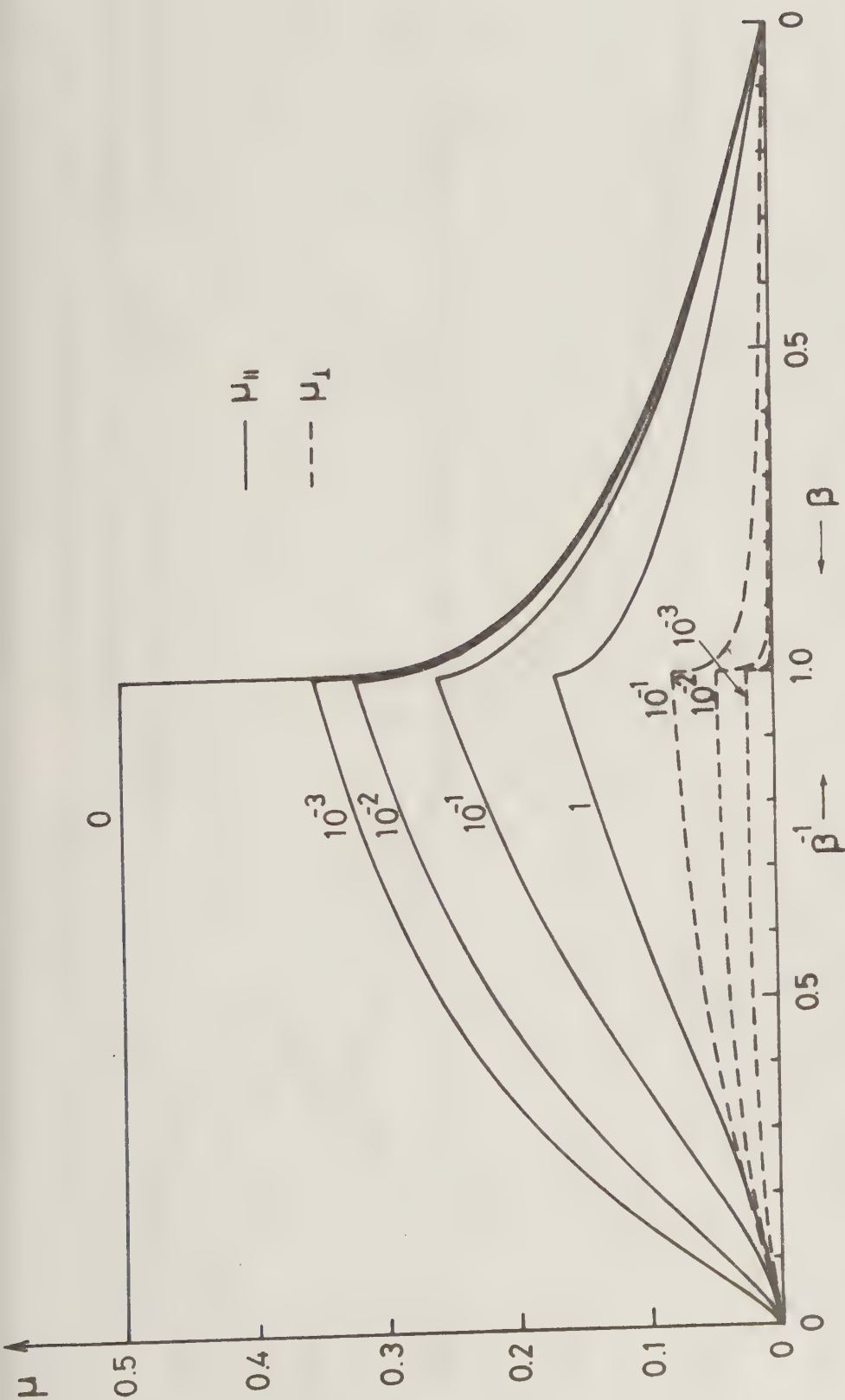


Abb. 18

Die Temperaturabhängigkeit der transversalen Korrelationen $\mu_{II} = \langle s_n^- s_{n+\delta_n}^+ \rangle$ und $\mu_I = \langle s_{n-1}^- s_{n+\delta_{n-1}}^+ \rangle$ für Anisotropieparameter $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel} \leq 1$. Die Funktionen sind in der Tieftemperaturphase über β^{-1} , in der paramagnetischen Phase über β aufgetragen. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_{\parallel}(2 + \lambda)$.

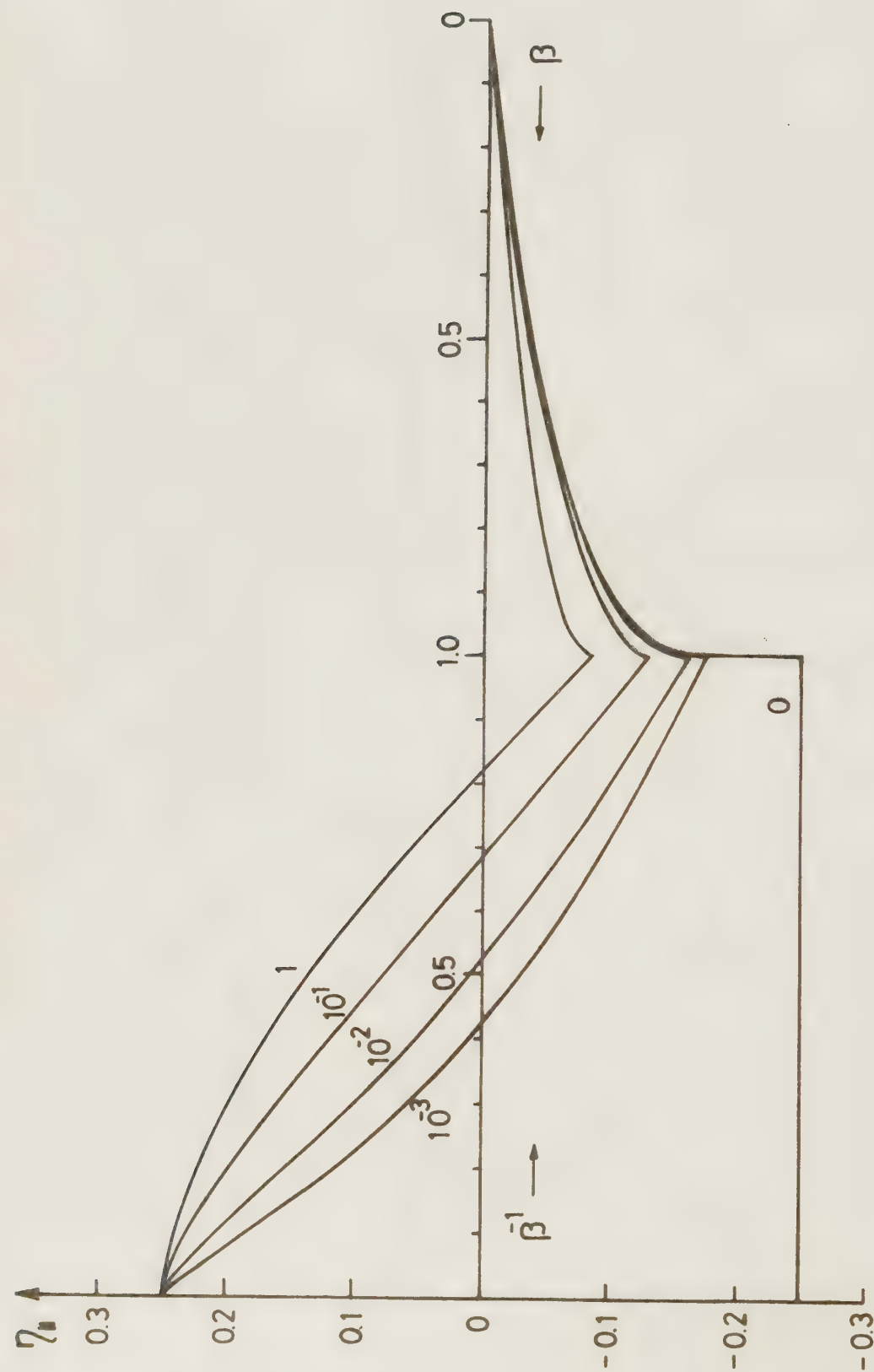


Abb. 19

Die Temperaturabhängigkeit der longitudinalen Korrelationen $\eta_{||} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{||}}^z \rangle$ für Anisotropieparameter $\lambda = I_{||}/I_{\perp} \leq 1$. Die Funktionen sind in der Tieftemperaturphase über β^{-1} , in der paramagnetischen Phase über β aufgetragen. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_{||}(2 + \lambda)$.

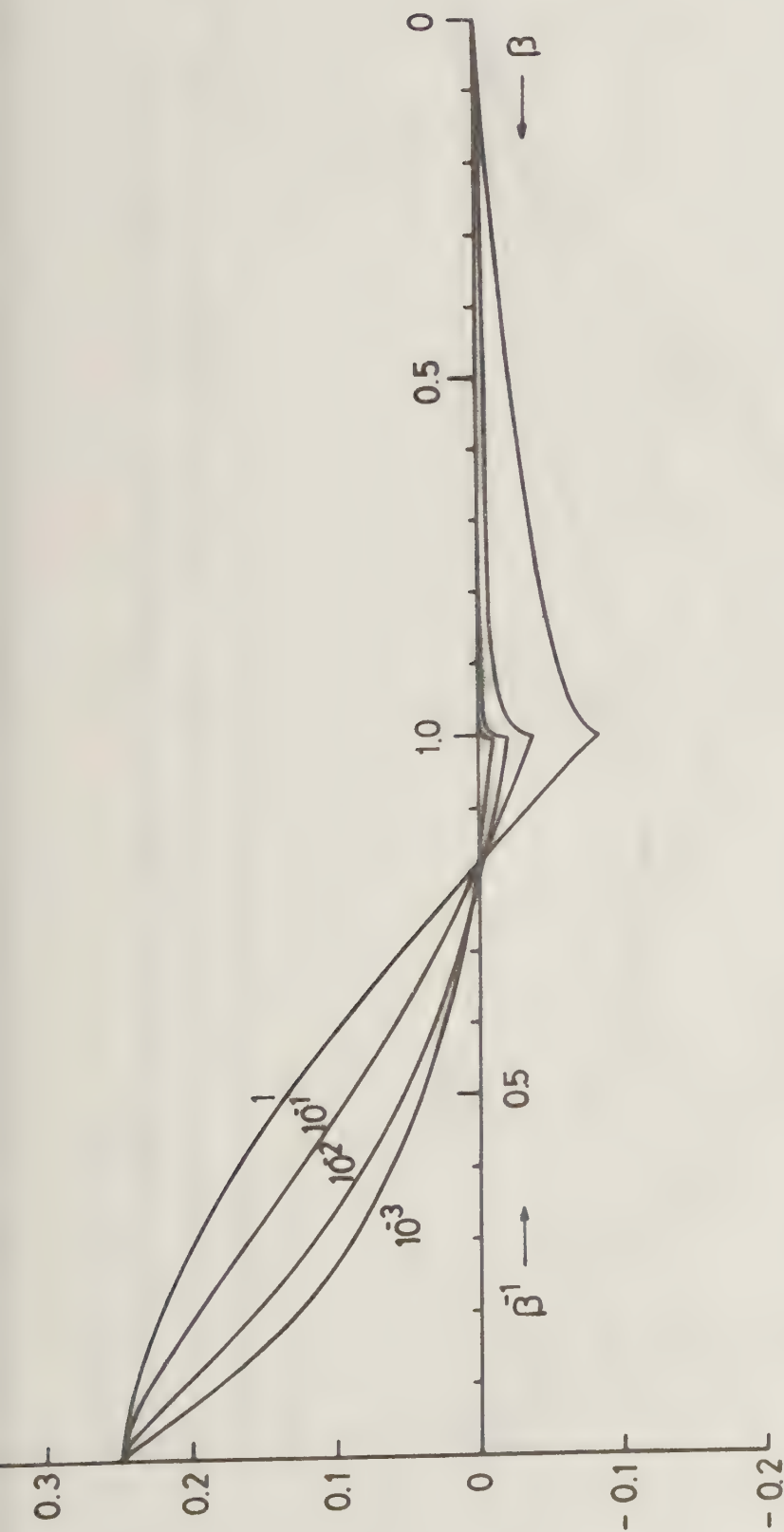


Abb. 20

Die Temperaturabhängigkeit der longitudinalen Korrelationsfunktion $\eta_\lambda = \langle s_n^z s_{n+\lambda}^z \rangle$ für Anisotropieparameter $\lambda = I_\lambda / I_0 \leq 1$. In der Tieftemperaturphase ist η_λ als Funktion von β^{-1} , in der paramagnetischen Phase als Funktion von β dargestellt. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_0 (2 + \lambda)$.

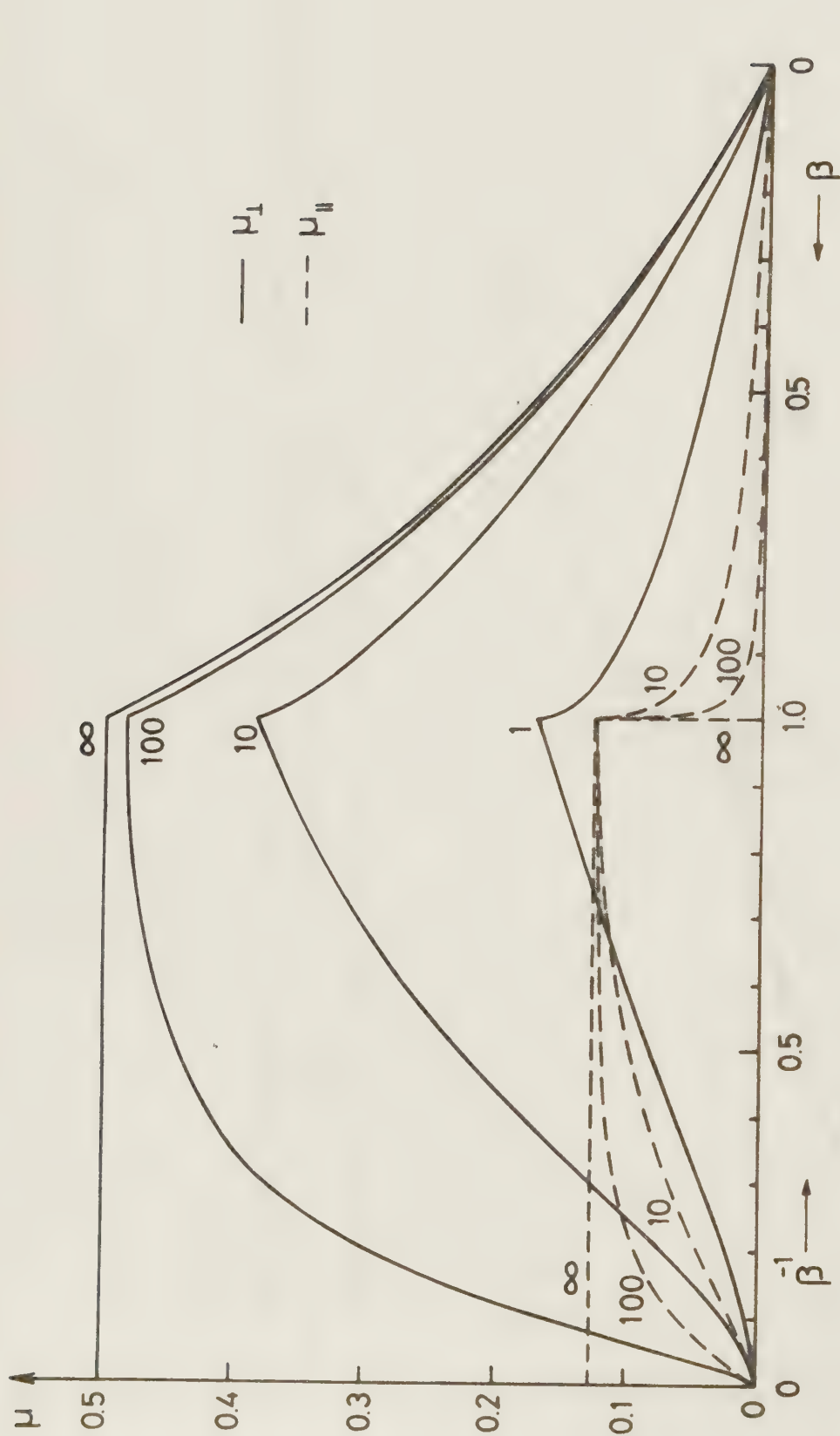


Abb. 21

Die Temperaturabhängigkeit der transversalen Korrelationen $\mu_{\perp} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{\perp}}^+ \rangle$ und $\mu_{\parallel} = \langle s_n^- s_{n+\delta_{\parallel}}^+ \rangle$ für Anisotropieparameter $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel} \geq 1$. Die Funktionen sind in der Tieftemperaturphase über β^{-1} in der paramagnetischen Phase über β aufgetragen. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_{\perp} (\frac{2}{\lambda} + 1)$.

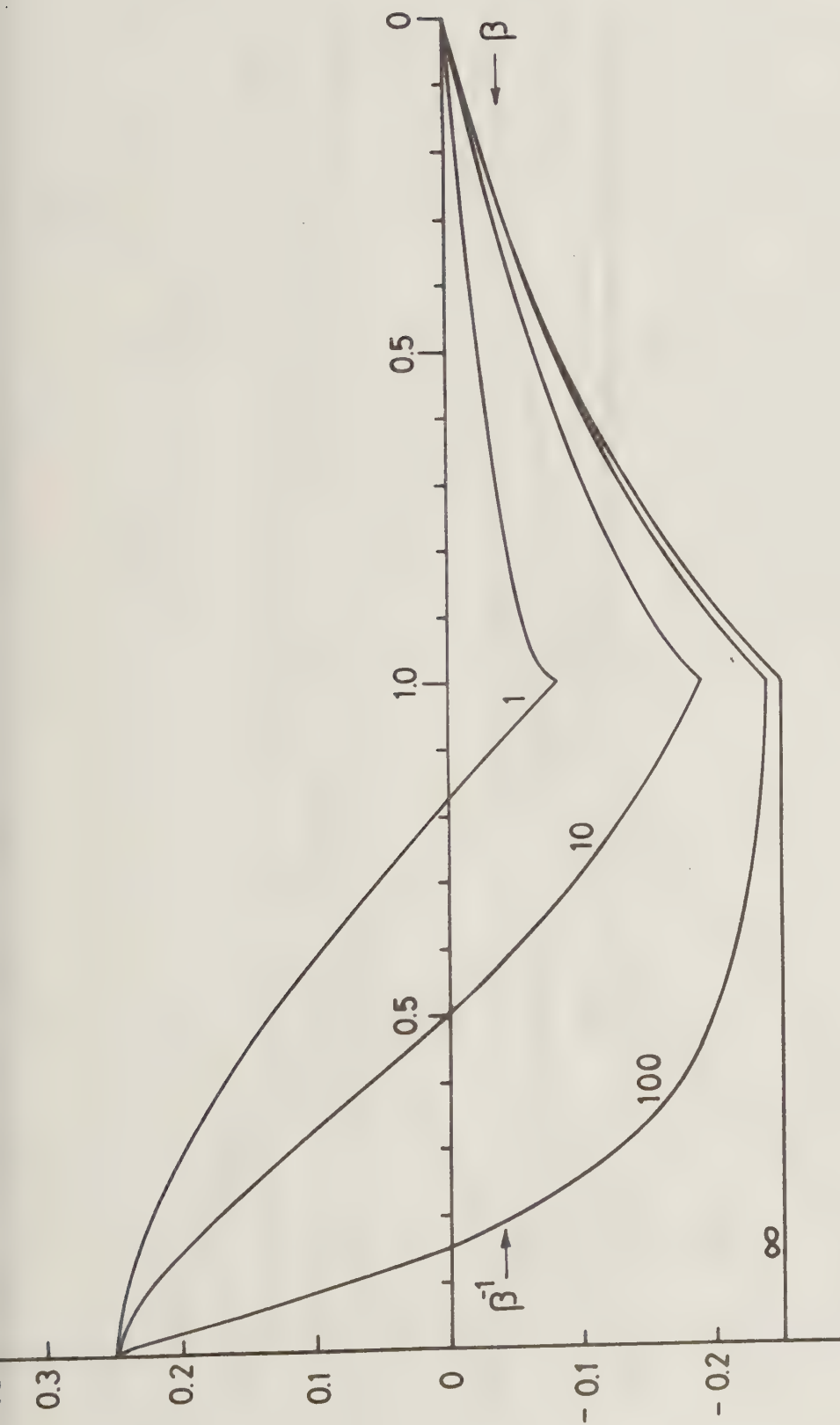


Abb. 22

Die Temperaturabhängigkeit der longitudinalen Korrelationen $\eta_A = \langle s_n^z s_{n+\delta_A}^z \rangle$ für Anisotropieparameter $\lambda = I_A/I_0 \geq 1$. Die Funktionen sind in der Tieftemperaturphase über β^{-1} , in der paramagnetischen Phase über β aufgetragen. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_A \left(\frac{2}{\lambda} + 1 \right)$.

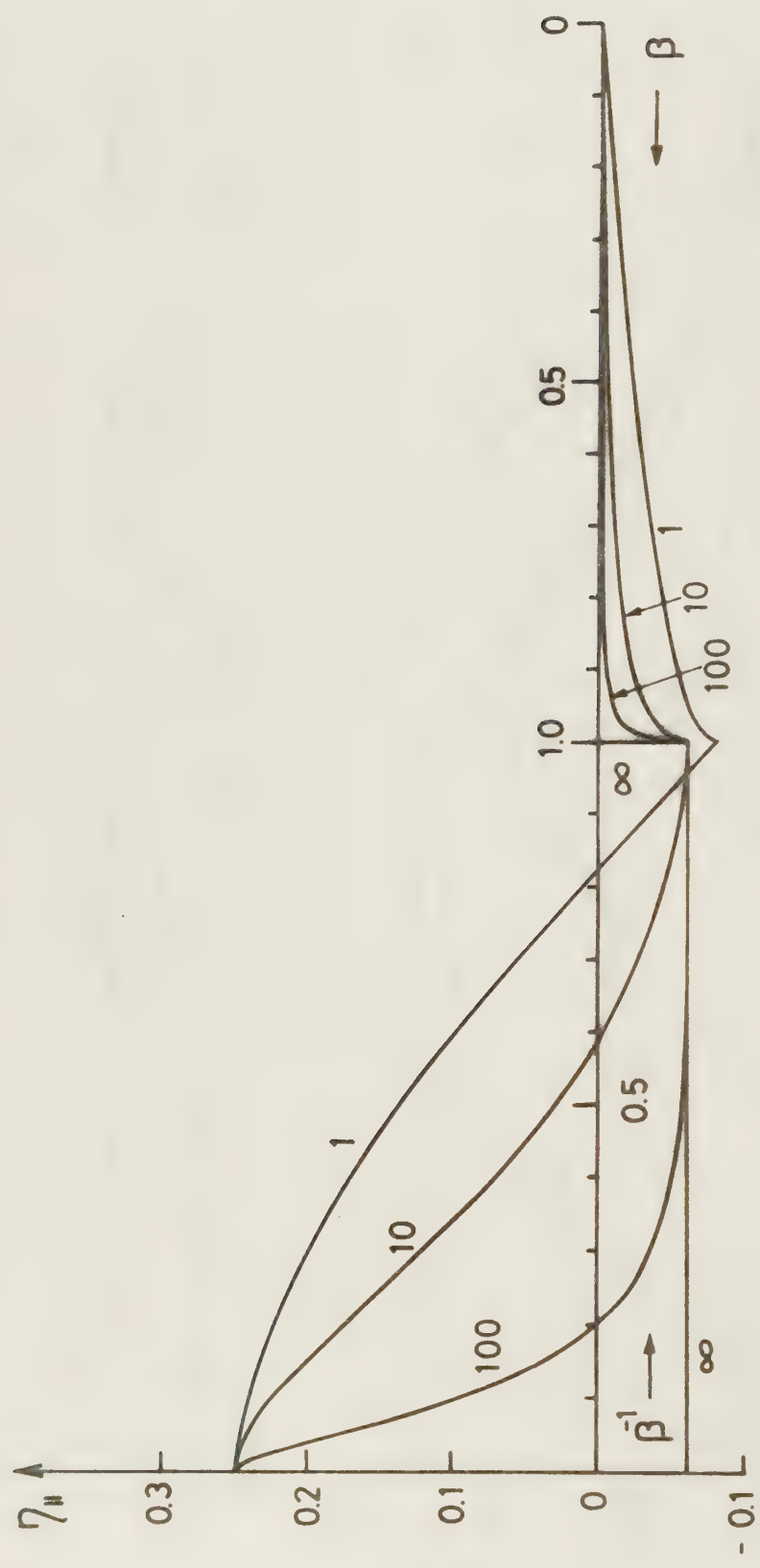


Abb. 23

Die Temperaturabhängigkeit der longitudinalen Korrelationen $\eta_L = \langle s_n^2 s_{n+\delta_L}^2 \rangle$ für Anisotropieparameter $\lambda = I_A/I_B \geq 1$. Die Funktionen sind in der Tieftemperaturphase über β^{-1} , in der paramagnetischen Phase über β aufgetragen. Temperatureinheit ist die jeweilige Curie-Temperatur $\beta_C^{-1} = I_A \left(\frac{2}{\lambda} + 1 \right)$.

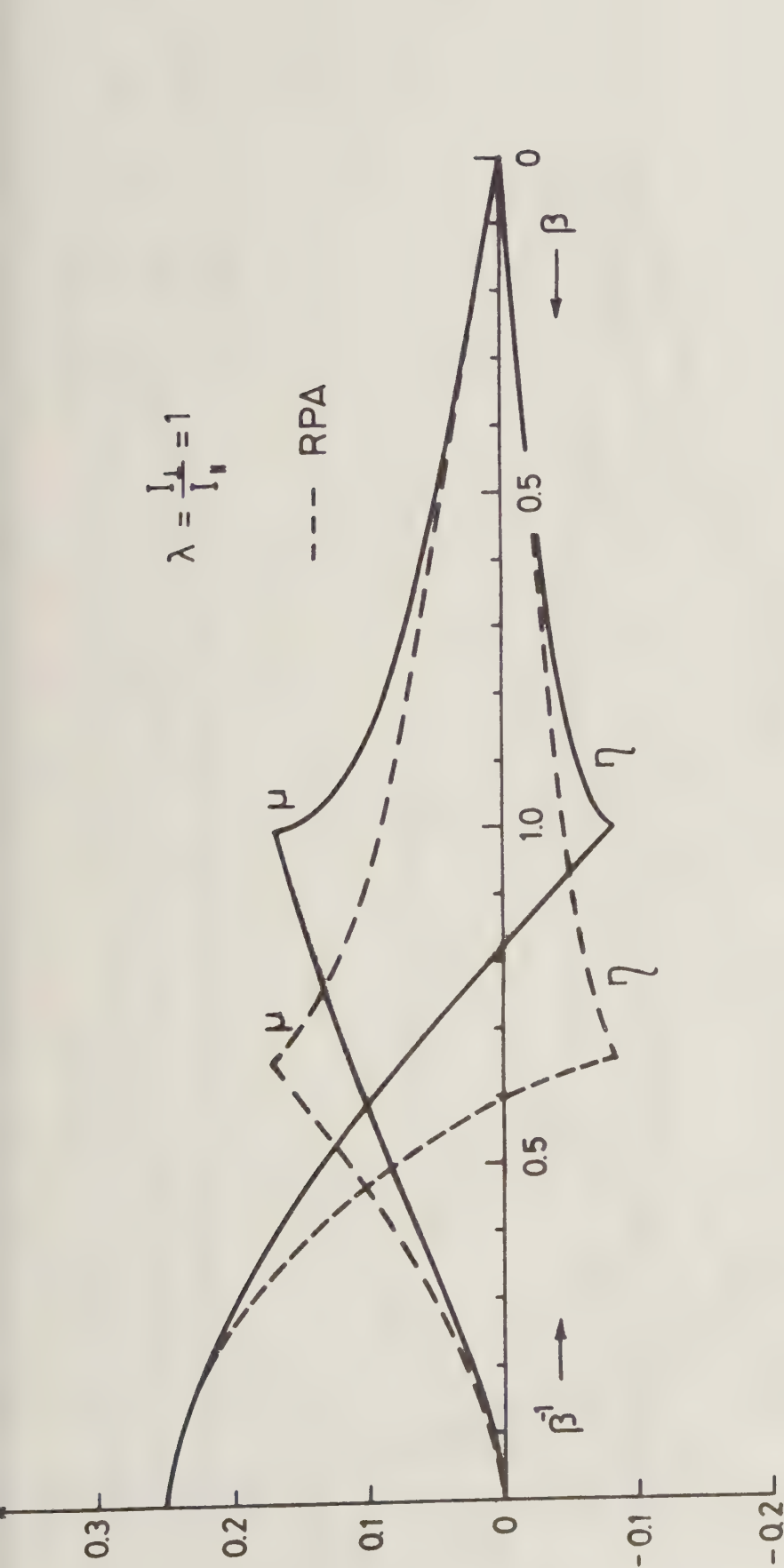


Abb. 24

Vergleich der Temperaturabhängigkeit der Nächstnachbarkorrelationen $\mu = \langle s_n^- s_{n+\delta}^+ \rangle$ und $\eta = \langle s_n^z s_{n+\delta}^z \rangle$ im isotropen dreidimensionalen Modell mit den Ergebnissen der RPA. Temperatureinheit ist die Curie-Temperatur der MFA. Die Funktionen sind für $\beta^{-1} < 1$ über β^{-1} , für $\beta^{-1} > 1$ über β aufgetragen.

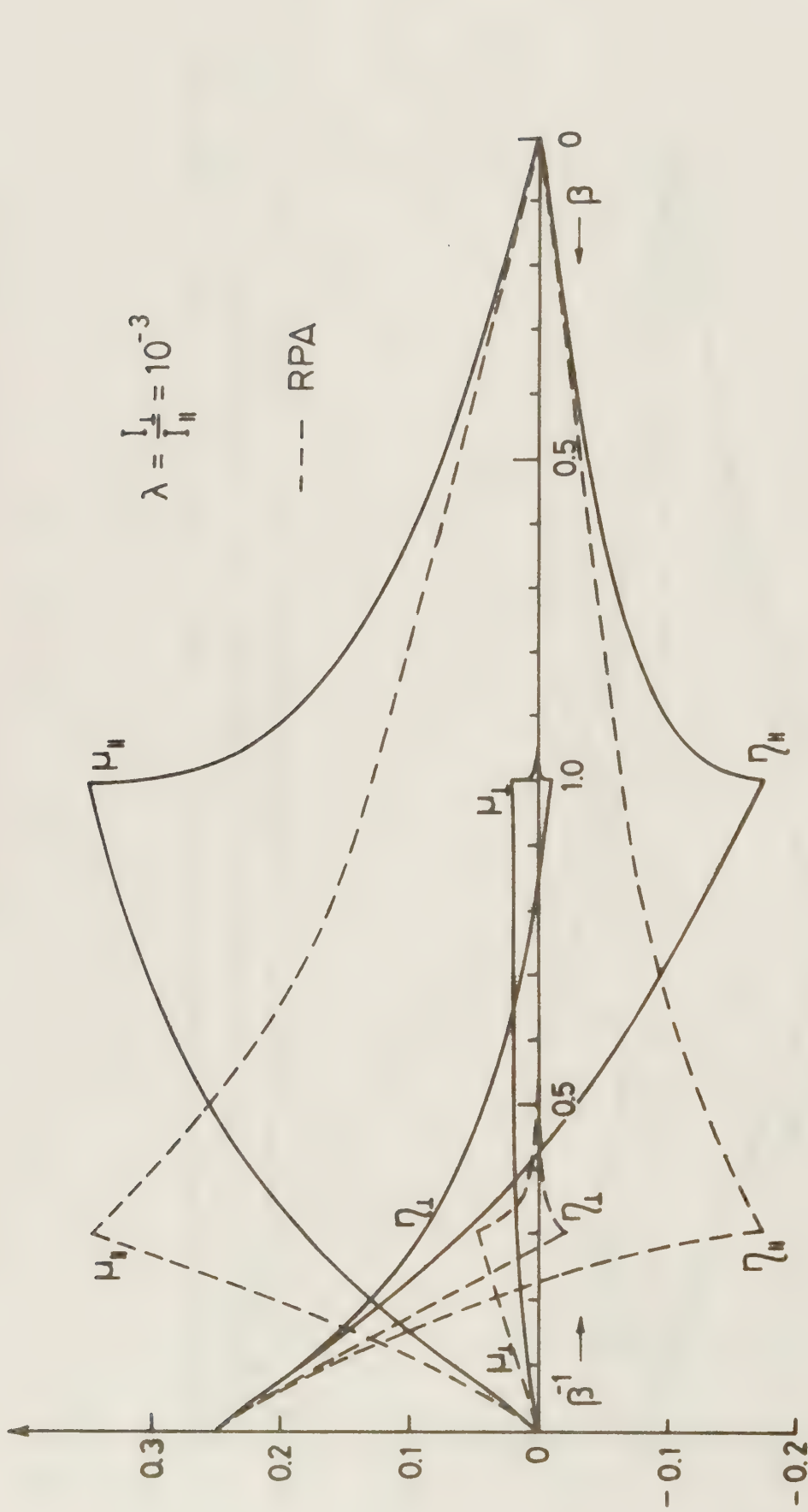


Abb. 25

Die Temperaturabhängigkeit der Nächstnachbarkorrelationen $\mu_{1,2} = \langle s_n^+ s_{n+\delta_{1,2}}^+ \rangle$ und $\eta_{1,2} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{1,2}}^z \rangle$ für das Anisotropieverhältnis $\lambda = I_1/I_2 = 10^{-3}$ im Vergleich mit den Resultaten der RPA. Temperatureinheit ist die Curie-Temperatur der MFA. Die Funktionen sind für $\beta^{-1} < 1$ über β^{-1} und für $\beta^{-1} > 1$ über β aufgetragen.

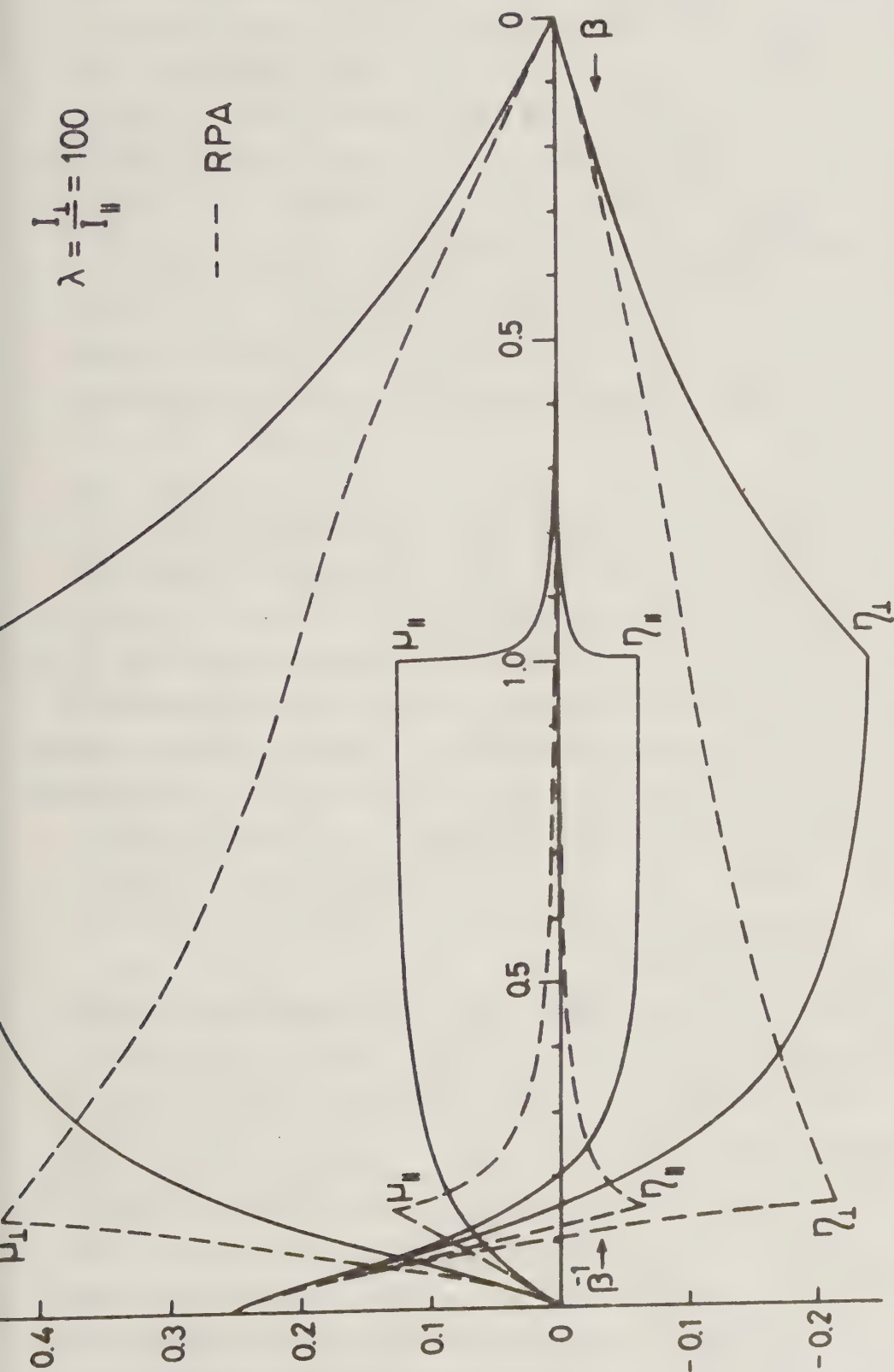


Abb. 26

Die Temperaturabhängigkeit der Nächstnachbarkorrelationen $\mu_{\parallel\perp} = \langle s_n^{\pm} s_{n+\delta_{\parallel\perp}}^{\pm} \rangle$ und $\eta_{\parallel\perp} = \langle s_n^z s_{n+\delta_{\parallel\perp}}^z \rangle$ für das Anisotropieverhältnis $\lambda = I_{\perp}/I_{\parallel} = 100$ im Vergleich mit den Resultaten der RPA. Temperatureinheit ist die Curie-Temperatur der MFA. Die Funktionen sind für $\beta^{-1} < 1$ über β^{-1} und für $\beta^{-1} > 1$ über β aufgetragen.

5. Zusammenfassung und kritische Beurteilung der Näherung

Wir haben ein Modell untersucht, das zur Beschreibung der ferromagnetischen Eigenschaften eines Festkörpers mit lokalisierten Momenten herangezogen werden kann, deren Wechselwirkung untereinander räumlich anisotrop ist, und an dem wir deshalb die Entwicklung von einem drei- zu einem zwei- bzw. eindimensionalen Magneten studieren konnten. Für die Magnetisierung dieses Modells haben wir eine obere Grenze bestimmt und mittels eines Näherungsverfahrens im Rahmen der Theorie der Greenschen Funktionen die Abhängigkeiten der spontanen Magnetisierung selbst und der Nächstnachbarkorrelationen von Temperatur und Anisotropieparameter betrachtet, sowie die Entwicklung des Spektrums der Elementaranregungen auf der statistischen Gesamtheit bei $T \neq 0$ mit zunehmender Anisotropie untersucht.

Für das isotrope dreidimensionale Modell und für Systeme mit schwacher Anisotropie fanden wir einen Übergang von einer paramagnetischen zu einer Tieftemperaturphase mit spontaner Magnetisierung bei einer Curie-Temperatur, die mit derjenigen in der Molekularfeldtheorie nach WEISS übereinstimmt und sich bei Messungen an Modellsubstanzen als zu hoch herausgestellt hat und durch andere Näherungsverfahren bereits besser approximiert wurde. Ebenfalls für die Suszeptibilität χ erhielten wir als Ergebnis das CURIE-WEISS-Gesetz der Molekularfeldtheorie, das bekanntlich in dem linearen Temperaturverlauf von χ^{-1} die Nahordnungseffekte in der Umgebung des Curie-Punktes nicht berücksichtigt.

Dagegen wird die Abnahme der spontanen Magnetisierung von ihrem Sättigungswert bei $T=0$ recht gut beschrieben, wobei die $T^{3/2}$ -Gesetzmäßigkeit mit den Ergebnissen der Spinwellentheorie von BLOCH in Einklang steht. In diesem Temperaturbereich finden wir auch eine dem Heisenberg-Modell angemessene Renormalisierung der Spinwellenenergien im Spektrum der Elementaranregungen, die bei tiefen Temperaturen durch den Kosinus des Winkels zwischen den Richtungen benachbarter Spins bestimmt wird und damit proportional zur inneren Energie des Systems erfolgen sollte. In unseren Ergebnissen weisen nun Renormalisierungsfaktoren und innere Energie den gleichen

Temperaturverlauf auf.

Mit zunehmender Anisotropie in den Austauschwechselwirkungen bricht unterhalb der Curie-Temperatur, die linear auf ihre MFA-Werte ungleich Null in zwei- und eindimensionalen Modellen zurückgeht, die Fernordnung zusammen, bis wir schließlich sowohl im Flächengitter als auch in der linearen Kette einen STANLEY-KAPLAN-Phasenübergang erhalten, der dadurch charakterisiert wird, daß in diesen niederdimensionalen Systemen in Übereinstimmung mit dem Theorem von MERMIN und WAGNER eine Divergenz in der Suszeptibilität einen Übergang zu einer Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung anzeigt. Parallel dazu geht mit den Werten der inter- bzw. intraplanaren Kopplung im Gitter der Beitrag der entsprechenden Impulse zum Spektrum der Elementaranregungen zurück, bis schließlich im Flächengitter und in der linearen Kette auch nur noch eine zwei- bzw. eindimensionale Anregungsenergie übrig bleibt.

In den Grenzfällen führt unsere Approximation nun auf eine Tieftemperaturphase, in der nach dem Abschalten eines äußeren, in Richtung der z-Achse angelegten symmetriebrechenden Feldes die Projektionen benachbarter Spins in die x, y-Ebene maximal korreliert sind und die longitudinalen Korrelationen $\langle s_n^z s_{n+\delta}^z \rangle$ ihren größten negativen Wert erreichen. Damit bestätigen wir die Ergebnisse von MUBAYI und LANGE, die mit derselben Näherungsmethode den zweidimensionalen Heisenberg-Ferromagneten untersuchten, die negativen Werte der longitudinalen Korrelationen allerdings verschwiegen.

Bei der Entwicklung zu den niederdimensionalen Modellen nimmt die spontane Magnetisierung $\bar{\sigma}$ zunächst relativ stärker im Bereich höherer Temperaturen ab, wodurch auch dort zuerst der Einfluß der niedrigeren Dimension hervortritt. Als Folge geht in der Nähe des Nullpunktes der Wert von $\bar{\sigma}$, jetzt in einer linearen Abhängigkeit, mit steigender Temperatur stark zurück. Dieser Rückgang der spontanen Magnetisierung macht sich bei vergleichbaren Anisotropieverhältnissen beim Übergang zur linearen Kette wesentlich früher bemerkbar als bei der Entwicklung zum Flächengitter, weil die Resultate in verschiedener Weise von der jeweils maßgebenden schwachen Kopplung beeinflußt werden. Während beim Übergang zum eindimensionalen Modell die spontane Magnetisierung proportional

zur intraplanaren Wechselwirkung zurückgeht, fällt die Abnahme von ϵ beim Übergang zum Flächengitter wegen einer logarithmischen Abhängigkeit von der interplanaren Kopplung entsprechend langsamer aus. Für diesen Spezialfall des quasi-zweidimensionalen Ferromagneten finden wir in unseren asymptotischen Untersuchungen die Resultate von MIKESKA wieder, wenn wir in dessen Modell die Spinanisotropie nicht berücksichtigen. Darüberhinaus können wir seine Interpolationen für den Verlauf der Magnetisierungskurven aufgrund unserer Rechnungen bestätigen.

Wegen der logarithmischen Gesetzmäßigkeit reicht also bereits eine sehr geringe interplanare Kopplung aus, um ein nahezu dreidimensionales Verhalten zu erzeugen. Daß die Ergebnisse für die spontane Magnetisierung in stark anisotropen Modellen dem wahren Verlauf recht nahe kommen, zeigt in den Abb. 12 (Seite 85) und 13 (Seite 86) ein Vergleich mit den Resultaten für eine obere Schranke, die wir berechneten und die ebenfalls einen entsprechend deutlichen Unterschied in der Abhängigkeit von dem Anisotropieparameter bei den zwei Übergängen zu den niederdimensionalen Systemen aufweist.

Unsere Ergebnisse für die Nächstnachbarkorrelationen, die von MIKESKA nicht untersucht wurden und von denen MUBAYI und LANGE nur den Wert der transversalen Korrelation im zweidimensionalen System angeben, lassen uns jetzt verstehen, wie die bislang nicht zu erklärenden Resultate im Flächengitter zustandekommen und welches Gewicht den zum Teil physikalisch unbefriedigenden Werten beizumessen ist. Im isotropen Modell nimmt die longitudinale Korrelation $\langle s_n^z s_{n+\delta}^z \rangle$ von ihrem maximalen Wert bei $T=0$, der eine parallele Ausrichtung benachbarter Spins kennzeichnet, bis zu einem negativen Wert am Curie-Punkt ab, um dann bei steigender Temperatur im paramagnetischen Bereich wieder zuzunehmen und für $T \rightarrow \infty$ Null zu erreichen. In einem entsprechend entgegengesetzten Verhalten nimmt der Wert der transversalen Korrelation $\langle s_n^- s_{n+\delta}^+ \rangle$ von Null bei $T=0$ bis zum Curie-Punkt zu, um dann in der paramagnetischen Phase mit steigender Temperatur wieder gegen Null abzufallen. Nimmt jetzt die interplanare oder die intraplanare Wechselwirkung ab, so können wir sehr schön beobachten,

wie sich in der Tieftemperaturphase der Anstieg der transversalen und der Abfall der longitudinalen Korrelationen zwischen denjenigen Spins, deren Kopplung unverändert bleibt, zunehmend stärker ausprägen. Schließlich nehmen diese Größen in den Grenzfällen des Flächengitters und der linearen Kette in dem gesamten Bereich unterhalb der Curie-Temperatur ihren maximalen bzw. minimalen Wert an.

Sehr oft haben wir unsere Ergebnisse mit den entsprechenden Resultaten der RPA verglichen, weil diese Näherung zumindest für das isotrope dreidimensionale Modell trotz gewisser Mängel als recht brauchbar anzusehen ist, allerdings aber nicht dazu herangezogen werden kann, einen STANLEY-KAPLAN-Phasenübergang in zweidimensionalen Systemen zu beschreiben. Denn die RPA-Curie-Temperatur, die schon im isotropen Ferromagneten tiefer liegt und deswegen realistischer ist, nimmt mit wachsender Anisotropie ab und verschwindet in den Grenzfällen der Entartung.

Für sehr tiefe Temperaturen weichen die Ergebnisse für die spontane Magnetisierung und die Korrelationen in beiden Näherungen nicht voneinander ab. Allerdings besitzt die von uns verwendete Näherung in der angemesseneren Renormalisierung der Spinwellenenergie einen Vorteil gegenüber der RPA. Gleiches Verhalten in der spontanen Magnetisierung finden wir auch unmittelbar unterhalb des Curie-Punktes, wo der Anstieg in erster Ordnung mit einem Potenzgesetz $(T_c - T)^{1/2}$ erfolgt.

In den Resultaten für die Korrelationen in den isotropen und schwach anisotropen Systemen fanden wir sowohl in der Tieftemperaturphase als auch im paramagnetischen Bereich keinen qualitativen Unterschied. Deshalb weisen auch beide Näherungen die gleichen Nachteile auf. Die Symmetrie in den Korrelationen bleibt auch noch oberhalb des Curie-Punktes gebrochen, aber diese Unzulänglichkeit ist in beiden Approximationen auf die Entkopplung der Greenschen Funktionen bereits in niedrigster Ordnung zurückzuführen. Ebenso erhalten wir auch in der RPA unterhalb der Curie-Temperatur für die longitudinalen Korrelationen negative Ergebnisse, die ja eigentlich als antiferromagnetische Nahordnung zu interpretieren wären, jedoch nicht überbewertet werden sollten, wenn sie in einem nur kleinen Bereich der ferromagnetischen Phase auftreten.

ten, im übrigen aber die Vorteile der Näherung diese Unzulänglichkeit aufwiegen. Allerdings erstrecken sich die negativen Korrelationswerte in unserer Approximation über ein größeres Temperaturintervall als in der RPA. Hier setzt nun auch ein qualitativer Unterschied zwischen den Ergebnissen in beiden Näherungen ein, wenn die Anisotropie zunimmt. Während weiterhin das Temperaturintervall mit einer ferromagnetischen Nahordnung nicht sehr differiert, weitet sich der Bereich mit den physikalisch unbefriedigenden Resultaten in unserer Näherung aus, in der RPA hingegen wird dieser Effekt durch eine stärkere Abnahme der Curie-Temperatur verhindert. Andererseits ist aber darauf hinzuweisen, daß in der Umgebung des Curie-Punktes auch die Beschreibung der longitudinalen Korrelationen durch die RPA bei wachsender Anisotropie immer unzulänglicher wird, da die negativen Spitzen immer prägnanter hervortreten.

Überdies zeigt ein Vergleich der Resultate aller Nächst-nachbarkorrelationsfunktionen am jeweiligen Curie-Punkt, die in Abb. 27 (Seite 109) dargestellt sind, eine nur geringe Abweichung. Im ein-, zwei- und im isotropen dreidimensionalen System hatten wir bereits eine völlige Übereinstimmung gefunden. Deshalb können wir feststellen, daß die Werte, die die RPA in Flächengittern und in der linearen Kette bei der RPA-Curie-Temperatur $T=0$ vorhersagt, bei uns in der gesamten Tieftemperaturphase gegeben sind. Weil bekanntlich aber die RPA schon unser isotropes dreidimensionales Modell in der Nähe des Curie-Punktes nicht optimal beschreibt, müssen wir daran zweifeln, ob wir in unserer Näherung eine realistische Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung wiedergeben.

Andererseits können wir aber keinesfalls eine geordnete Phase, wie wir sie für das ein- und das zweidimensionale Modell gefunden haben, von vornherein verwerfen, eine Phase mit spontaner Magnetisierung ist ja ausgeschlossen. Denn unsere Näherung bestätigt die Möglichkeit von Elementaranregungen auf der statistischen Gesamtheit bei $T \neq 0$. Zudem deutet die gegenüber der RPA schwächere, aber angemessenere Renormalisierung der Spinwellenenergie in nur leicht anisotropen Systemen bei tiefen Temperaturen auf eine höhere Curie-Temperatur als dort. Damit scheint auch in Flächengittern und

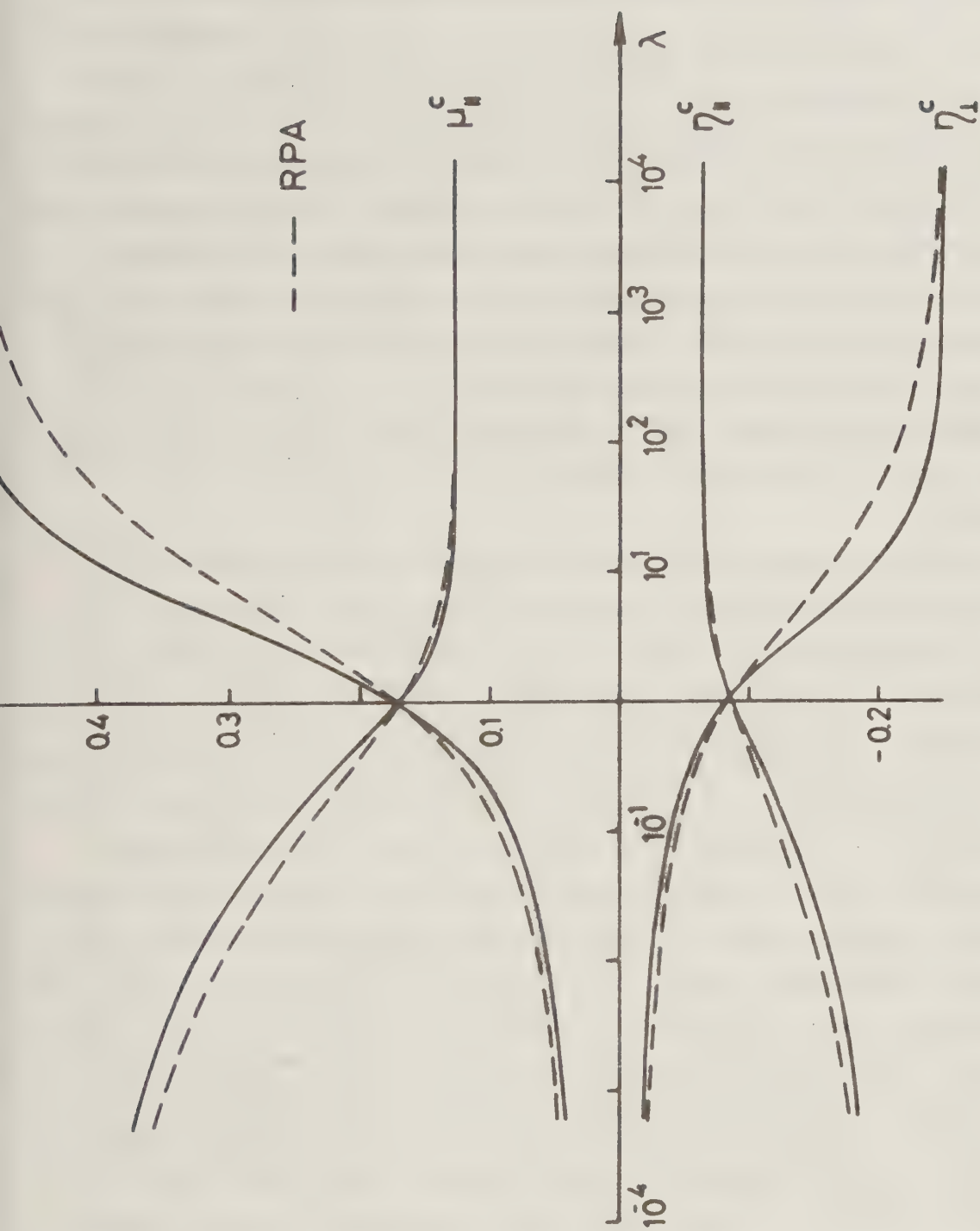


Abb. 27

Die Abhängigkeit der Werte der Nächstnachbarkorrelationen $\mu_{n+1} = \langle s_n^+ s_{n+1}^+ \rangle$ und $\gamma_n = \langle s_n^z s_{n+1}^z \rangle$ am Curie-Punkt vom Anisotropieparameter $\lambda = I_z / I_x$ im Vergleich mit den Resultaten der RPA.

linearen Ketten eine Singularität in der Suszeptibilität für von Null verschiedene Temperaturen durchaus möglich zu sein.

Aber dennoch können unserer Meinung nach diese Vorteile und die Voraussage eines STANLEY-KAPLAN-Phasenübergangs die Unzulänglichkeiten dieser Approximation nicht aufwiegen. Unter ihnen sehen wir nicht so sehr die hohe Curie-Temperatur, denn es hat sich herausgestellt, daß schon eine geringe Veränderung in der Entkopplung der Bewegungsgleichungen für die Green-schen Funktionen in der niedrigsten Ordnung die Höhe der Curie-Temperatur stark beeinflussen kann. So erhielt CALLEN (1963) bei der Absicht, die Ergebnisse der RPA unterhalb des Curie-Punktes zu verbessern, eine Übergangstemperatur, die vom Resultat der RPA sehr stark abweicht und fast diejenige der MFA erreicht.

Vielmehr begründen wir unsere Kritik an der Näherung mit den Ergebnissen für die Suszeptibilität sowie die longitudinalen Korrelationen $\langle s_n^z s_{n+d}^z \rangle$ in der Tieftemperaturphase. Wenn auch die Güte einer Näherung nicht unabhängig von der Dimension des betrachteten Modells sein muß, so ist es doch als ein schwerwiegender Nachteil anzusehen, daß auch im isotropen dreidimensionalen Ferromagneten die Suszeptibilität dem Curie-Weiss-Gesetz gehorcht. Die Existenz eines STANLEY-KAPLAN-Phasenübergangs im zweidimensionalen Modell hat man sich damit erkaufte, daß die Berücksichtigung der Nahordnungseffekte wieder fallengelassen wurden, die in der RPA besonders in der Umgebung des Curie-Punktes die Temperaturabhängigkeit der MFA-Suszeptibilität modifizierten und keineswegs vernachlässigt werden sollten. Darüberhinaus lassen die Ergebnisse für die longitudinalen Korrelationen den Eindruck entstehen, daß sich die Tieftemperaturphase in dem Flächengitter und in der linearen Kette aus einem Bereich der ferromagnetischen Phase im isotropen dreidimensionalen Modell entwickelt hat, in dem bereits dort die Eigenschaften eines Ferromagneten nur mangelhaft beschrieben werden. Speziell diese letzte Behauptung können wir aber auch nur deshalb aufstellen, weil wir in unserem Modell die Entwicklung von einem drei- zu einem zweidimensionalen bzw. eindimensionalen Ferromagneten verfolgten. Beschränkt man sich von vornherein wie MUBAYI und LANGE auf das zweidimensionale Modell oder wie MIKESKA auf das quasi-

zweidimensionale System, so müssen zwangsläufig die Ursachen für die unbefriedigenden Resultate der Korrelationen verborgen bleiben.

Wägen wir Vorzüge und Unzulänglichkeiten unserer Näherungsmethode gegeneinander ab, so glauben wir, die Ergebnisse unserer Untersuchungen nur als eine schwache Unterstützung für die Vermutung von STANLEY und KAPLAN ansehen zu können, daß in zweidimensionalen Heisenberg-Ferromagneten eine Divergenz in der Suszeptibilität bei $T \neq 0$ existiert, die einen Phasenübergang zu einer Tieftemperaturphase ohne spontane Magnetisierung anzeigt, zumal wir einen derartigen Übergang auch im eindimensionalen Modell fanden, wo er wesentlich unwahrscheinlicher ist.

Anhang 1: Berechnung des Kommutators $[[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-]$ in der Ungleichung (3.2.3)

Es wird der Kommutator

$$[[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-]$$

berechnet, wobei s_k^+ und s_{-k}^- die Fourierkomponenten (2.4a) der Spinumklappoperatoren s_n^+ bzw. s_n^- (2.5) bedeuten und $\mathcal{H}$ durch den Hamiltonoperator (2.6) in der Impulsdarstellung

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (J_{||}(\vec{k}) + J_{\perp}(\vec{k})) (s_k^+ s_{-k}^- + s_k^z s_{-k}^z) + H' s_0^z$$

gegeben ist. Mit Hilfe der Kommutatorbeziehungen (2.8b) bestimmen wir zunächst $[s_k^+, \mathcal{H}]$:

$$\begin{aligned} [s_k^+, \mathcal{H}] &= -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) ([s_k^+, s_{k-k'}^+ s_{-k'}^-] + [s_k^+, s_{k-k'}^z s_{-k'}^z]) + H' [s_k^+, s_0^z] \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) (2s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z - s_{k-k'}^z s_{-k'}^+ - s_{k+k'}^+ s_{-k'}^z) - H' s_k^+ \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) (2s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z - [s_{k-k'}^z, s_{-k'}^+] - s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z - s_{k+k'}^+ s_{-k'}^z) - H' s_k^+ \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) (2s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z - s_{-k'}^+ - s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z - s_{k+k'}^+ s_{-k'}^z) - H' s_k^+ \\ [s_k^+, \mathcal{H}] &= -\frac{2}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) (s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z - s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z) - H' s_k^+ \end{aligned}$$

Dabei wurde bei der letzten Umformung ausgenutzt, daß

$\sum_{\vec{k}} (J_{||}(\vec{k}) + J_{\perp}(\vec{k})) = 0$ ist, ferner $J_{||}(-\vec{k}) = J_{||}(\vec{k})$ und $J_{\perp}(-\vec{k}) = J_{\perp}(\vec{k})$ gilt und mit $\vec{k}$ auch $-\vec{k}$ in der Brillouinzone enthalten ist. Mit dem Ergebnis für den Kommutator $[s_k^+, \mathcal{H}]$ rechnen wir nun weiter und erhalten

$$\begin{aligned} [[s_k^+, \mathcal{H}], s_{-k}^-] &= -\frac{2}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) ([s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z, s_{-k}^-] - [s_{k-k'}^+ s_{-k'}^z, s_{-k}^-]) - H' [s_k^+, s_{-k}^-] \\ &= -\frac{2}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}')) (-s_{k-k'}^+ s_{-k}^- + 2s_{k-k'}^z s_{-k-k'}^z + s_{k-k'}^+ s_{-k-k'}^- - 2s_{-k}^z s_{k-k'}^z) - 2H' s_0^z \\ &= -\frac{2}{N} \sum_{\vec{k}'} (J_{||}(\vec{k}-\vec{k}') - J_{||}(\vec{k}') + J_{\perp}(\vec{k}-\vec{k}') - J_{\perp}(\vec{k}')) (2s_{-k}^z s_{k-k'}^z + s_{k-k'}^+ s_{-k}^-) - 2H' s_0^z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} (J_{\parallel}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\parallel}(\mathbf{k}') + J_{\perp}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\perp}(\mathbf{k}')) (2s_{-\mathbf{k}'}^z s_{\mathbf{k}'}^z + \frac{1}{2} [s_{\mathbf{k}'}^+, s_{-\mathbf{k}'}^-] + \frac{1}{2} \{s_{\mathbf{k}'}^+, s_{-\mathbf{k}'}^-\}_{+}) - 2H' s_0^z \\
 &= -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} (J_{\parallel}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\parallel}(\mathbf{k}') + J_{\perp}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\perp}(\mathbf{k}')) (2s_{-\mathbf{k}'}^z s_{\mathbf{k}'}^z + s_0^z + \frac{1}{2} \{s_{\mathbf{k}'}^+, s_{-\mathbf{k}'}^-\}_{+}) - 2H' s_0^z \\
 &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} (J_{\parallel}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\parallel}(\mathbf{k}') + J_{\perp}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\perp}(\mathbf{k}')) (4s_{-\mathbf{k}'}^z s_{\mathbf{k}'}^z + \{s_{\mathbf{k}'}^+, s_{-\mathbf{k}'}^-\}_{+}) - 2H' s_0^z.
 \end{aligned}$$

Wiederum benutzen wir die Beziehung $\sum_{\mathbf{k}'} (J_{\parallel}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\parallel}(\mathbf{k}') + J_{\perp}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\perp}(\mathbf{k}')) = 0$.
Mit diesem Ergebnis

$$[[s_{\mathbf{k}}^+, \mathcal{H}], s_{-\mathbf{k}}^-] = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} (J_{\parallel}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\parallel}(\mathbf{k}') + J_{\perp}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - J_{\perp}(\mathbf{k}')) (4s_{-\mathbf{k}'}^z s_{\mathbf{k}'}^z + \{s_{\mathbf{k}'}^+, s_{-\mathbf{k}'}^-\}_{+}) - 2H' s_0^z$$

für den Kommutator $[[s_{\mathbf{k}}^+, \mathcal{H}], s_{-\mathbf{k}}^-]$ gehen wir in die Ungleichung (3.2.3) ein.

Anhang 2: Anmerkungen zur Auswertung des Integrals in (3.2.19) und die Anwendung auf einige Strukturen in den drei kubischen Raumgittern

Beim Nenner des Integranden im Integral

$$(A2.1) \quad F(I_{\parallel}, I_{\perp}) = \int_{\mathcal{D}} d^3k \frac{1}{I_{\parallel} \sum_{\delta_{\parallel}} (\vec{k} \vec{\delta}_{\parallel})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k} \vec{\delta}_{\perp})^2}$$

handelt es sich um eine quadratische Form

$$(A2.2) \quad Q = I_{\parallel} \sum_{\delta_{\parallel}} (\vec{k} \vec{\delta}_{\parallel})^2 + I_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}} (\vec{k} \vec{\delta}_{\perp})^2 = \vec{k}^T A \vec{k}$$

in den Komponenten des Vektors $\vec{k}$. A sei die Matrix dieser quadratischen Form und $\vec{k}^T$ der zu $\vec{k}$ transponierte Vektor. $F(I_{\parallel}, I_{\perp})$ besitzt unter folgenden zwei Voraussetzungen eine einfache analytische Gestalt:

1. Die Matrix A der quadratischen Form Q besitzt zwei identische Eigenwerte.
2. Bei dem Integrationsbereich $\mathcal{D}$ handelt es sich um einen Kreiszylinder.

Als Matrix einer quadratischen Form kann A immer symmetrisch gewählt werden und ist für $I_{\parallel} > 0$, $I_{\perp} > 0$ positiv definit.

Daher existiert eine orthogonale Matrix T, so daß

$$(A2.3) \quad T^T A T = \mathcal{D}$$

Diagonalform besitzt.

Durch die Variablensubstitution $\vec{r} = T^T \vec{R}$ erhält man für (A2.1)

$$(A2.4) \quad F(I_{||}, I_{\perp}) = \int_{\mathcal{V}'} d^3\ell \frac{1}{\lambda_1(\ell_1^2 + \ell_2^2) + \lambda_3 \ell_3^2}.$$

Dabei bezeichnen λ_1, λ_3 die von den Austauschwechselwirkungen $I_{||}$ und $I_{\perp}$ abhängigen Eigenwerte von A und $\mathcal{V}'$ den durch die Drehung aus $\mathcal{V}$ hervorgegangenen Integrationsbereich. Handelt es sich bei $\mathcal{V}'$ um einen Kreiszylinder

$$\mathcal{V}' : \ell_1^2 + \ell_2^2 \leq R^2, \quad |\ell_3| \leq h,$$

so erhält man nach Einführung von Zylinderkoordinaten als Ergebnis der Integration die Beziehungen

$$(A2.5) \quad F(I_{||}, I_{\perp}) = \frac{2\pi}{\lambda_1} \left\{ h \ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3} R^2 + h^2 \right) + 2R \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_3}} \arctan \left(\frac{h}{R} \sqrt{\frac{\lambda_3}{\lambda_1}} \right) - 2h \ln h \right\}$$

und speziell

$$(A2.6) \quad F(I_{||}, I_{\perp}) = \frac{2\pi m}{\lambda_1} \left\{ \ln \left(1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_3} \right) + 2 \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_3}} \arctan \sqrt{\frac{\lambda_3}{\lambda_1}} \right\}$$

für den Fall, daß $R=h=m$ gilt.

Die Resultate (A2.5) und (A2.6) können wir für die Bestimmung der oberen Grenze der spontanen Magnetisierung (3.2.18) heranziehen, sofern wir bei den zu betrachtenden Strukturen die Voraussetzungen über die Identität zweier Eigenwerte von A und den Integrationsbereich erfüllen können.

1. Kubisch-einfaches Gitter

Mit der Wechselwirkung $I_{||}$ zwischen benachbarten Spins in einer (001)-Netzebene und der Kopplung $I_{\perp}$ in allen anderen Fällen teilen sich die Nächstnachbarvektoren in

$$(A2.7) \quad \vec{\delta}_{||} : \pm(1,0,0), \pm(0,1,0) \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_{\perp} : \pm(0,0,1)$$

auf. Also besitzt die Matrix

$$(A2.8) \quad A = \begin{pmatrix} 2I_{||} & 0 & 0 \\ 0 & 2I_{||} & 0 \\ 0 & 0 & 2I_{\perp} \end{pmatrix}$$

der quadratischen Form (A2.2) bereits Diagonalgestalt. Als Integrationsbereich wählen wir den Kreiszyylinder

$$(A2.9) \quad \mathcal{B} : k_1^2 + k_2^2 \leq \pi^2, \quad |k_3| \leq \pi,$$

der vollständig in der Brillouinzone $\mathcal{B}$ enthalten ist. Indem wir in dem allgemeinen Ergebnis (A2.6) die für dieses Beispiel gültigen Werte

$$(A2.10) \quad \lambda_{\parallel} = 2I_{\parallel}, \quad \lambda_{\perp} = 2I_{\perp} \quad \text{und} \quad m = \pi$$

einsetzen, erhalten wir

$$(A2.11) \quad g_{\parallel}(\lambda) = 2\sqrt{2\pi} \left\{ \ln\left(1 + \frac{1}{\lambda}\right) + 2\sqrt{\frac{1}{\lambda}} \arctan\sqrt{\lambda} \right\}^{-1/2}$$

bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

für die Abhängigkeit (3.2.20) der oberen Grenze der spontanen Magnetisierung von dem Verhältnis λ der beiden unterschiedlichen Wechselwirkungen (es gilt $v_c = 1$ für das kubisch-einfache Gitter).

2. Kubisch-raumzentriertes Gitter

a. Die Aufteilung der Nächstnachbarvektoren bei einer Wechselwirkung $I_{\parallel}$ zwischen benachbarten Spins in einer (101)-Netzebene, während die Kopplung sonst den Wert $I_{\perp}$ beträgt, ist mit

$$(A2.12) \quad \vec{\delta}_{\parallel} : \begin{array}{l} \pm \frac{1}{2}(1, 1, -1) \\ \pm \frac{1}{2}(1, -1, -1) \end{array} \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_{\perp} : \begin{array}{l} \pm \frac{1}{2}(1, 1, 1) \\ \pm \frac{1}{2}(1, -1, 1) \end{array}$$

gegeben. Die Eigenwerte der Matrix

$$(A2.13) \quad A = \begin{pmatrix} I_{\parallel} + I_{\perp} & 0 & -I_{\parallel} + I_{\perp} \\ 0 & I_{\parallel} + I_{\perp} & 0 \\ -I_{\parallel} + I_{\perp} & 0 & I_{\parallel} + I_{\perp} \end{pmatrix}$$

der quadratischen Form (A2.2) bestimmen sich zu

$$(A2.14) \quad \lambda_1 = 2\bar{I}_n, \quad \lambda_2 = 2\bar{I}_1, \quad \lambda_3 = \bar{I}_n + \bar{I}_1.$$

Hier handelt es sich um das einzige der von uns betrachteten Beispiele, für das sich die allgemeinen Überlegungen zu Beginn dieses Anhangs nur in modifizierter Form übernehmen lassen, denn die Voraussetzung der Identität zweier Eigenwerte ist jetzt im allgemeinen nicht erfüllt. Die Resultate (A2.5) und (A2.6) können wir jedoch auch jetzt noch ausnutzen, wenn wir die Voraussetzung über den Integrationsbereich abändern. Bei diesem soll es sich jetzt nicht um einen Zylinder mit einem Kreis, sondern einer Ellipse als Grundfläche handeln. Führen wir im Anschluß an die Transformation, die uns die quadratische Form (A2.2) auf Diagonalgestalt bringt, in dem Integral

$$(A2.15) \quad F(\bar{I}_n, \bar{I}_1) = \int_{\mathcal{Z}'} d^3\ell \frac{1}{\lambda_1 \ell_1^2 + \lambda_2 \ell_2^2 + \lambda_3 \ell_3^2}$$

noch die Variablensubstitution

$$(A2.16) \quad \ell'_3 = \begin{cases} \sqrt{\frac{\bar{I}_n + \bar{I}_1}{2\bar{I}_n}} \ell_3 & \text{für } \bar{I}_1 \leq \bar{I}_n \\ \sqrt{\frac{\bar{I}_n + \bar{I}_1}{2\bar{I}_1}} \ell_3 & \text{für } \bar{I}_n \leq \bar{I}_1 \end{cases}$$

durch, so erlaubt uns der Übergang zu Zylinderkoordinaten, die Ergebnisse (A2.5) und (A2.6) zu benutzen.

Wählen wir als Integrationsbereich in (A2.1) den Zylinder

$$(A2.17) \quad \mathcal{Z}': \quad \ell_1^2 + \frac{\bar{I}_n + \bar{I}_1}{2\bar{I}_n} \ell_3^2 \leq \frac{\pi^2}{2}, \quad |\ell_2| \leq \frac{\pi}{\sqrt{2}} \quad \text{für } \bar{I}_1 \leq \bar{I}_n$$

$$\ell_2^2 + \frac{\bar{I}_n + \bar{I}_1}{2\bar{I}_1} \ell_3^2 \leq \frac{\pi^2}{2}, \quad |\ell_1| \leq \frac{\pi}{\sqrt{2}} \quad \text{für } \bar{I}_n \leq \bar{I}_1,$$

so liefert uns das Einsetzen der für dieses Beispiel gültigen Werte

$$(A2.18) \quad \lambda_1 = 2\bar{I}_u, \quad \lambda_3 = 2\bar{I} \quad \text{und} \quad m = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \quad \text{für} \quad \bar{I}_\perp \leq \bar{I}_u$$

bzw.

$$\lambda_1 = 2\bar{I}_\perp, \quad \lambda_3 = 2\bar{I}_u \quad \text{und} \quad m = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \quad \text{für} \quad \bar{I}_u \leq \bar{I}_\perp$$

in die Beziehung (A2.6) die Abhängigkeit

$$(A2.19a) \quad g_u(\lambda) = \frac{8\pi^{1/2}}{3^{3/4}} (1+\lambda)^{1/4} \left\{ \ln\left(1+\frac{1}{\lambda}\right) + 2\sqrt{\frac{1}{\lambda}} \arctan\sqrt{\lambda} \right\}^{-1/2} \quad \text{für} \quad \bar{I}_\perp \leq \bar{I}_u$$

bzw.

$$(A2.19b) \quad g_\perp(\lambda) = \frac{8\pi^{1/2}}{3^{3/4}} \left(1+\frac{1}{\lambda}\right)^{1/4} \left\{ \ln(1+\lambda) + 2\sqrt{\lambda} \arctan\sqrt{\frac{1}{\lambda}} \right\}^{-1/2} \quad \text{für} \quad \bar{I}_u \leq \bar{I}_\perp$$

der oberen Schranke für die spontane Magnetisierung von λ (es gilt $v_c = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^3$ für das kubisch-raumzentrierte Gitter).

b. In diesem zweiten Beispiel eines kubisch-raumzentrierten Gitters seien die nächsten Nachbarn innerhalb einer $(1\bar{1}2)$ -Netzebene über $\bar{I}_\perp$ gekoppelt, sonst besitze die Wechselwirkung den Wert $\bar{I}_u$. Mit den Nächstnachbarvektoren

$$\pm \frac{1}{2} (1, -1, 1)$$

$$(A2.20) \quad \vec{\delta}_\perp: \pm \frac{1}{2} (1, -1, -1) \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_u: \pm \frac{1}{2} (1, 1, 1)$$

$$\pm \frac{1}{2} (1, 1, -1)$$

erhalten wir als Matrix der quadratischen Form (A2.2)

$$(A2.21) \quad A = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3\bar{I}_u + \bar{I}_\perp & \bar{I}_u - \bar{I}_\perp & \bar{I}_u - \bar{I}_\perp \\ \bar{I}_u - \bar{I}_\perp & 3\bar{I}_u + \bar{I}_\perp & -\bar{I}_u + \bar{I}_\perp \\ \bar{I}_u - \bar{I}_\perp & -\bar{I}_u + \bar{I}_\perp & 3\bar{I}_u + \bar{I}_\perp \end{pmatrix}$$

deren Eigenwerte

$$(A2.22) \quad \lambda_1 = \frac{1}{4} (\bar{I}_u + 3\bar{I}_\perp), \quad \lambda_2 = \lambda_3 = \bar{I}_u$$

sind. Als Integrationsbereich wählen wir den Kreiszylinder

$$(A2.23) \quad \mathcal{Z}: \quad \begin{aligned} & |k_1 - k_2 - k_3| \leq 3\pi(\sqrt{2} - 1) \\ & 3(k_1 + k_2)^2 + (k_1 - k_2 + 2k_3)^2 \leq 18\pi^2(3 - 2\sqrt{2}), \end{aligned}$$

dessen Höhe

$$(A2.24) \quad h = 2\pi\sqrt{3}(\sqrt{2}-1)$$

doppelt so groß wie der Radius seiner Grundfläche ist. Mit den Eigenwerten λ_i und dem Wert für den Radius erhalten wir aus (A2.6) die Beziehung

$$(A2.25) \quad g_{||}(\lambda) = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3\sqrt{\sqrt{2}-1}} \left\{ \ln\left(1 + \frac{4}{1+3\lambda}\right) + \frac{4}{\sqrt{1+3\lambda}} \arctan \frac{\sqrt{1+3\lambda}}{2} \right\}^{-1/2}$$

bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{||}(\lambda)$$

für die Wechselwirkungsabhängigkeit der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung 6.

3. Kubisch-flächenzentriertes Gitter

a. Bei einer Austauschwechselwirkung $I_{||}$ zwischen benachbarten Spins in einer (010)-Netzebene und einer Kopplung $I_{\perp}$ sonst finden wir mit den Nächstnachbarvektoren

$$(A2.26) \quad \vec{\delta}_{||} : \begin{matrix} \pm \frac{1}{2}(1, 0, 1) \\ \pm \frac{1}{2}(1, 0, -1) \end{matrix} \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_{\perp} : \begin{matrix} \pm \frac{1}{2}(1, 1, 0), \pm \frac{1}{2}(0, 1, 1) \\ \pm \frac{1}{2}(1, -1, 0), \pm \frac{1}{2}(0, 1, -1) \end{matrix}$$

als Matrix der quadratischen Form (A2.2)

$$(A2.27) \quad A = \begin{pmatrix} I_{||} + I_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & 2I_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & I_{||} + I_{\perp} \end{pmatrix}.$$

Bei der Wahl des Kreiszylinders

$$(A2.28) \quad \mathcal{D} : k_1^2 + k_3^2 \leq \pi, \quad |k_2| \leq \pi$$

als Integrationsgebiet in (A2.1) erhalten wir mit

$$(A2.29) \quad \lambda_1 = I_{||} + I_{\perp}, \quad \lambda_3 = 2I_{\perp} \quad \text{und} \quad m = \sqrt{\eta}$$

aus (A2.6) die Beziehungen

$$(A2.30) \quad g_{\parallel}(\lambda) = 2^{\frac{7}{4}} \pi^{\frac{1}{2}} \sqrt{1+\lambda} \left\{ \ln\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2\lambda}\right) + 2\sqrt{\frac{1+\lambda}{2\lambda}} \operatorname{arctan} \sqrt{\frac{2\lambda}{1+\lambda}} \right\}^{-1/2}$$

bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda),$$

da das Volumen der Einheitszelle jetzt mit $v_c = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^3$ gegeben ist.

b. Nun herrsche zwischen den benachbarten Spins in einer (111)-Netzebene die Kopplung $I_{\parallel}$, während ihr Wert sonst $I_{\perp}$ betrage. Die Nächstnachbarvektoren

$$(A2.31) \quad \vec{\delta}_{\parallel} : \begin{array}{ll} \pm \frac{1}{2}(1, 0, -1) & \pm \frac{1}{2}(1, 1, 0) \\ \pm \frac{1}{2}(1, -1, 0) & \text{und} \quad \vec{\delta}_{\perp} : \pm \frac{1}{2}(1, 0, 1) \\ \pm \frac{1}{2}(0, 1, -1) & \pm \frac{1}{2}(0, 1, 1) \end{array}$$

führen auf die Matrix

$$(A2.32) \quad A = \begin{pmatrix} I_{\parallel} + I_{\perp} & \frac{-I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} & \frac{-I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} \\ \frac{-I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} & I_{\parallel} + I_{\perp} & \frac{-I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} \\ \frac{-I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} & \frac{-I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} & I_{\parallel} + I_{\perp} \end{pmatrix}$$

der quadratischen Form (A2.2), deren Eigenwerte

$$(A2.33) \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \frac{3I_{\parallel} + I_{\perp}}{2}, \quad \lambda_3 = 2I_{\perp}$$

lauten. Führt man die Integration in (A2.1) über den Kreiszyylinder

$$(A2.34) \quad \mathcal{J} : 3(k_1 - k_2)^2 + (k_1 + k_2 - 2k_3)^2 \leq 18\pi^2(3 - 2\sqrt{2}), \quad |k_1 + k_2 + k_3| \leq 3\pi(\sqrt{2} - 1)$$

aus, so können wir mit den Werten

$$(A2.35) \quad \lambda_1 = \frac{3I_{\parallel} + I_{\perp}}{2}, \quad \lambda_3 = 2I_{\perp} \quad \text{und} \quad m = \pi\sqrt{3}(\sqrt{2} - 1)$$

in (A2.6) eingehen. Für die Abhängigkeit der oberen Schranke der spontanen Magnetisierung von $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ finden wir somit

$$g_{||}(\lambda) = 2^{5/4} \pi^{1/2} (1+\sqrt{2})^{1/2} 3^{-3/4} \sqrt{3+\lambda} \left\{ \ln\left(\frac{5}{4} + \frac{3}{4\lambda}\right) + \sqrt{\frac{3+\lambda}{\lambda}} \arctan\left(2\sqrt{\frac{\lambda}{3+\lambda}}\right) \right\}^{-1/2}$$

(A2.36) bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{||}(\lambda).$$

c. Bei einer Wechselwirkung $I_{\perp}$ zwischen benachbarten Spins in einer (101)-Netzebene, während sie sonst über $I_{||}$ gekoppelt sind, bestimmen wir mit den Nächstnachbarvektoren

$$(A2.37) \quad \vec{\delta}_{\perp} : \pm \frac{1}{2}(1, 0, 1) \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_{||} : \pm \frac{1}{2}(0, 1, 1) \\ \pm \frac{1}{2}(1, 1, 0) \\ \pm \frac{1}{2}(0, 1, -1) \quad \pm \frac{1}{2}(1, -1, 0)$$

die Matrix der quadratischen Form (A2.2) zu

$$(A2.38) \quad A = \begin{pmatrix} \frac{3I_{||} + I_{\perp}}{2} & 0 & \frac{I_{||} - I_{\perp}}{2} \\ 0 & 2I_{\perp} & 0 \\ \frac{I_{||} - I_{\perp}}{2} & 0 & \frac{3I_{||} + I_{\perp}}{2} \end{pmatrix}$$

und erhalten für deren Eigenwerte

$$(A2.39) \quad \lambda_1 = \lambda_2 = 2I_{||} \quad , \quad \lambda_3 = I_{||} + I_{\perp} .$$

Integrationsbereich in (A2.1) sei der Kreiszyylinder

$$(A2.40) \quad \mathcal{D} : \frac{1}{2}(k_1 + k_3)^2 + k_2^2 \leq \frac{\pi^2}{2} \quad , \quad |k_1 - k_3| \leq \pi$$

mit der Höhe

$$(A2.41) \quad h = \pi\sqrt{2} .$$

Wegen

$$(A2.42) \quad \lambda_1 = 2I_{||} \quad , \quad \lambda_3 = I_{||} + I_{\perp} \quad \text{und} \quad m = \frac{\pi}{\sqrt{2}}$$

erhalten wir aus (A2.6) die Abhängigkeit

$$(A2.43) \quad g_{||}(\lambda) = 4\sqrt{2\pi} \left\{ \ln\left(1 + \frac{2}{2+\lambda}\right) + 2\sqrt{\frac{2}{1+\lambda}} \arctan\sqrt{\frac{1+\lambda}{2}} \right\}^{-1/2}$$

bzw.

$$g_{\perp}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} g_{\parallel}(\lambda)$$

als Ergebnis.

Anhang 3: Beweis der Behauptungen (4.4.6a,b)

Es wird die Gültigkeit der Beziehungen

$$(A3.1) \quad \left. \begin{aligned} \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\parallel}} &\neq 0 \\ \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} &\neq 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{für } \beta^{-1} > 2I_{\parallel} + I_{\perp}$$

nachgewiesen, wobei $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ die in (4.3.12) definierten Renormalisierungsfaktoren in der Energie der Elementaranregungen darstellen und H' das äußere Magnetfeld kennzeichnet. Wir wollen voraussetzen, daß beide Kopplungskonstanten $I_{\parallel}$ und $I_{\perp}$ von Null verschieden sind, und die Spezialfälle des zwei- und des eindimensionalen Gitters gesondert behandeln.

Um den Grenzwert von $\frac{H'}{C_{\parallel}}$ bestimmen zu können, gehen wir von der Ungleichung (4.4.5c) aus und nehmen an, daß $\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\parallel}} = 0$ für $\beta^{-1} > 2I_{\parallel} + I_{\perp}$ gilt. Ersetzen wir für $N \rightarrow \infty$ die Summe über die Vektoren $\vec{k}$ der Brillouinzone $\mathcal{B}$ gemäß

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}} \longrightarrow \frac{v_c}{(2\pi)^3} \int_{\mathcal{B}} d^3k \quad v_c: \text{Volumen der Einheitszelle des Gitters}$$

durch ein Integral, wobei wir berücksichtigen, daß $v_c = 1$ für das kubisch-einfache Gitter gilt, so verschwindet unter dieser Annahme der Term

$$(A3.2) \quad \frac{H'}{C_{\parallel}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathcal{B}} d^3k \frac{1}{\frac{H'}{C_{\parallel}} + 2I_{\parallel}E_{\parallel}(k_1, k_2) + 2\frac{C_{\perp}}{C_{\parallel}}I_{\perp}E_{\perp}(k_3)}$$

in (4.4.5c) für $H' \rightarrow 0$. Um dieses einzusehen, brauchen wir nur diejenigen Fälle untersuchen, in denen das Integral divergieren kann. Für eine verschwindende Feldstärke H' ist aber eine Divergenz nur aufgrund der Singularität des Integranden im Punkt $\vec{k} = 0$ möglich. Es reicht also aus, als Integrationsbereich statt der Brillouinzone einen Kreiszylinder

$$(A3.3) \quad \mathcal{L} : \quad 0 \leq k_1^2 + k_2^2 \leq k_0^2, \quad |k_3| \leq k_0, \quad k_0 \ll 1$$

um den Mittelpunkt der Brillouinzone zu wählen und die in $E_{||}(k_1, k_2)$ und $E_{\perp}(k_3)$ auftretenden cos-Funktionen durch ihre Entwicklung bis zu Termen 2. Ordnung zu ersetzen. Die Auswertung des Integrals liefert dann

$$(A3.4) \quad \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{\frac{H'}{C_{||}} + I_{||}(k_1^2 + k_2^2) + \frac{C_{\perp}}{C_{||}} I_{\perp} k_3^2}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{I_{||}} \left\{ k_0 \ln \frac{H' + k_0^2 (C_{||} I_{\perp} + C_{\perp} I_{||})}{H' + k_0^2 C_{\perp} I_{||}} + 2 \sqrt{\frac{H' + k_0^2 C_{||} I_{\perp}}{C_{\perp} I_{||}}} \arctan \left(k_0 \sqrt{\frac{C_{\perp} I_{||}}{H' + k_0^2 C_{||} I_{\perp}}} \right) - 2 \sqrt{\frac{H'}{C_{\perp} I_{||}}} \arctan \left(k_0 \sqrt{\frac{C_{\perp} I_{||}}{H'}} \right) \right\}$$

Multipliziert mit dem Faktor $\frac{H'}{C_{||}}$ verschwinden die beiden Terme in (A3.4), die den arctan enthalten, im Grenzfall $H' \rightarrow 0$ für alle Grenzwerte von $\frac{H'}{C_{||}}$ und $\frac{C_{||}}{C_{\perp}}$ wegen

$$(A3.5) \quad \frac{1}{x} \arctan(k_0 x) \approx \begin{cases} k_0 & \text{für } x \ll 1 \\ \frac{\pi}{x} & \text{für } x \gg 1 \end{cases}$$

Es muß also nur noch der Grenzwert der Größe

$$(A3.6) \quad P(H, C_{||}, C_{\perp}) = \frac{H'}{C_{||} I_{||}} \ln \left\{ \frac{\frac{H'}{C_{||} I_{||}} + k_0^2 \left(1 + \frac{C_{\perp} I_{||}}{C_{||} I_{||}} \right)}{\frac{H'}{C_{||} I_{||}} + k_0^2 \frac{C_{\perp} I_{||}}{C_{||} I_{||}}} \right\}$$

für $H' \rightarrow 0$ untersucht werden. Wir unterscheiden jetzt die drei Fälle

$$1. \quad 0 < \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{C_{\perp} I_{||}}{C_{||} I_{||}} < \infty$$

$$2. \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{C_{\perp} I_{||}}{C_{||} I_{||}} = \infty$$

$$3. \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{C_{\perp} I_{||}}{C_{||} I_{||}} = 0.$$

Im 1. Fall verschwindet der Grenzwert von P trivialerweise wegen des Faktors $\frac{H'}{C_{||}}$. Im 2. Fall strebt das Argument der

ln-Funktion in (A3.6) gegen 1 und damit verschwindet $\lim_{H' \rightarrow 0} P$ ebenfalls. Für den 3. Fall nutzen wir die Abschätzung

$$\frac{x}{1+x} \leq \ln(1+x) \leq x$$

aus, um $\lim_{H' \rightarrow 0} P$ zu bestimmen. In

$$(A3.7) \quad P = \frac{H'}{C_n I_n} \ln \left(\frac{H'}{C_n I_n} + k_0^2 \left(1 + \frac{C_\perp I_\perp}{C_n I_n} \right) \right) - \frac{H'}{C_n I_n} \ln \frac{H'}{C_n I_n} - \frac{H'}{C_n I_n} \ln \left(1 + k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{H'} \right)$$

gelten die Grenzwerte

$$\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_n I_n} \ln \left(\frac{H'}{C_n I_n} + k_0^2 + k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{C_n I_n} \right) = 0$$

und

$$\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_n I_n} \ln \frac{H'}{C_n I_n} = 0$$

sowie die Abschätzungen

$$(A3.8) \quad \frac{\frac{H'}{C_n I_n} k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{H'}}{1 + k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{H'}} \leq \frac{H'}{C_n I_n} \ln \left(1 + k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{H'} \right) \leq \frac{H'}{C_n I_n} k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{H'}$$

Läßt man in diesen Ungleichungen die Feldstärke gegen Null gehen, so folgt

$$\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_n I_n} \ln \left(1 + k_0^2 \frac{C_\perp I_\perp}{H'} \right) = 0$$

und damit

$$\lim_{H' \rightarrow 0} P(H, C_n, C_\perp) = 0.$$

Somit haben wir also gezeigt, daß unter der Annahme $\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_n} = 0$

$$(A3.9) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_n} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{\frac{H'}{C_n} + 2I_n E_n(k_1, k_2) + 2 \frac{C_\perp}{C_n} I_\perp E_\perp(k_3)} = 0$$

im Temperaturbereich $\beta^{-1} > 2I_n + I_\perp$ gilt. Aber damit tritt ein Widerspruch zur Ungleichung (4.4.5c) ein, also kann unsere Annahme nicht richtig sein, vielmehr muß

$$(A3.10) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\parallel}} \neq 0 \quad \text{für} \quad \beta^{-1} > 2I_{\parallel} + I_{\perp}$$

gelten. Die gesonderte Untersuchung für $I_{\perp} = 0$, das bedeutet die Betrachtung des zweidimensionalen Heisenberg-Ferromagneten, brauchen wir nicht durchführen, da sie bereits von MUBAYI und LANGE (1969) vorgenommen wurde, ihr Ergebnis ist in (A3.10) eingeschlossen, wenn wir $I_{\perp} = 0$ setzen.

Für den Beweis der zweiten Behauptung in (A3.1) gehen wir diesmal von der Annahme aus, daß $\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} = 0$ für $\beta^{-1} > 2I_{\parallel} + I_{\perp}$ ist. Die Integration über die Variablen k_1 und k_2 in (4.4.5b) liefert die Ungleichung

$$(A3.11) \quad \beta \geq \frac{C_{\perp}}{C_{\parallel} I_{\parallel}} \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dk_3 \frac{E_{\perp}(k_3)}{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}} + \frac{C_{\perp} I_{\perp}}{2C_{\parallel} I_{\parallel}} E_{\perp}(k_3)} K \left(\frac{1}{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}} + \frac{C_{\perp} I_{\perp}}{2C_{\parallel} I_{\parallel}} E_{\perp}(k_3)} \right)$$

Hierbei bezeichnet $K(k)$ das vollständige elliptische Integral 1. Art zum Modul k . Der Wert des Integrals wird sicherlich nicht größer, wenn wir $K(k)$ durch sein Minimum im Integrationsgebiet ersetzen, wodurch wir

$$(A3.12) \quad \beta \geq \frac{C_{\perp}}{C_{\parallel} I_{\parallel}} K \left(\frac{1}{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}} + \frac{C_{\perp} I_{\perp}}{C_{\parallel} I_{\parallel}}} \right) \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dk_3 \frac{E_{\perp}(k_3)}{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}} + \frac{C_{\perp} I_{\perp}}{2C_{\parallel} I_{\parallel}} E_{\perp}(k_3)}$$

erhalten und die Integration über k_3 jetzt analytisch durchführen können, deren Ergebnis

$$(A3.13) \quad \beta \geq \frac{2}{\pi I_{\perp}} K \left(\frac{1}{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}} + \frac{C_{\perp} I_{\perp}}{C_{\parallel} I_{\parallel}}} \right) \left\{ 1 - \sqrt{\frac{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}}}{1 + \frac{H'}{4C_{\parallel} I_{\parallel}} + \frac{C_{\perp} I_{\perp}}{C_{\parallel} I_{\parallel}}}} \right\}$$

liefert. Wie wir im ersten Teil dieses Anhangs gesehen haben, ist $\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\parallel}}$ ungleich Null, daher schließen wir unter der Annahme $\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} = 0$, daß wegen

$$(A3.14) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} = \lim_{H' \rightarrow 0} \left(\frac{H'}{C_{\parallel}} \cdot \frac{C_{\parallel}}{C_{\perp}} \right) = \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\parallel}} \cdot \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{C_{\parallel}}{C_{\perp}} = 0$$

ebenfalls

$$(A3.15) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{C_{\parallel}}{C_{\perp}} = 0$$

gilt. Führen wir den Grenzübergang $H' \rightarrow 0$ in der Ungleichung (A3.13) durch, erhalten wir deshalb

$$(A3.16) \quad \beta \geq \frac{2}{\pi I_{\perp}} K(0) = \frac{1}{I_{\perp}}.$$

Da wir unsere Überlegungen lediglich auf den Temperaturbereich $\beta < \frac{1}{2I_{\parallel} + I_{\perp}}$ bezogen, tritt wiederum ein Widerspruch zur Annahme auf, also muß

$$(A3.17) \quad \lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} \neq 0 \quad \text{für} \quad \beta^{-1} > 2I_{\parallel} + I_{\perp}$$

sein. Auch in dem speziellen Fall des eindimensionalen Modells, das wir für $I_{\parallel} = 0$ erhalten, gilt die Ungleichung (A3.16). Statt von (4.4.5b) haben wir diesmal von der Abschätzung

$$(A3.18) \quad \frac{1}{C_{\perp}} \geq \frac{2}{\beta} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dk \frac{1 - \cos k}{H' + 2C_{\perp}I_{\perp}(1 - \cos k)}$$

auszugehen, und die Bestimmung des Integrals

$$\int_{-\pi}^{+\pi} dk \frac{1 - \cos k}{H' + 2C_{\perp}I_{\perp}(1 - \cos k)} = \frac{1}{2C_{\perp}I_{\perp}} \left[2\pi - H' \left(\frac{2\pi}{\sqrt{H'} \sqrt{H' + 4C_{\perp}I_{\perp}}} \right) \right]$$

(A3.19)

$$= \frac{\pi}{C_{\perp}I_{\perp}} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 4 \frac{C_{\perp}I_{\perp}}{H'}}} \right)$$

führt sofort auf einen Widerspruch zur Annahme $\lim_{H' \rightarrow 0} \frac{H'}{C_{\perp}} = 0$ für $\beta^{-1} > I_{\perp}$.

Damit ist die Gültigkeit der zu Beginn dieses Anhangs aufgestellten Behauptungen gezeigt worden, aus denen dann weiter geschlossen werden kann, daß die Renormalisierungsfaktoren $C_{\parallel}$ und $C_{\perp}$ oberhalb der Temperatur $\beta_c^{-1} = 2I_{\parallel} + I_{\perp}$ mit dem äußeren Feld verschwinden.

Anhang 4: Asymptotische Tieftemperaturentwicklungen für schwach gekoppelte Netzebenen und schwach gekoppelte Spinketten

1. Schwach gekoppelte Netzebenen ($I_{\perp} \ll I_{\parallel}$)

Bevor wir nach asymptotischen Lösungen des Gleichungssystems (4.5.11)

$$(A4.1a) \quad \frac{1}{G} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n x} \left(1 + \frac{1}{8nx} + \frac{9}{128n^2x^2} + \dots \right)^2 e^{-ny} \bar{I}_0(ny)$$

$$(A4.1b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n x} \left(1 + \frac{1}{8nx} + \frac{9}{128n^2x^2} + \dots \right) \left(\frac{1}{2nx} + \frac{3}{16n^2x^2} + \dots \right) e^{-ny} \bar{I}_0(ny)$$

$$(A4.1c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n x} \left(1 + \frac{1}{8nx} + \frac{9}{128n^2x^2} + \dots \right)^2 e^{-ny} (\bar{I}_0(ny) - \bar{I}_1(ny))$$

$$x = 2\beta C_{\parallel} I_{\parallel}, \quad y = 2\beta C_{\perp} I_{\perp}$$

für $y \ll 1$ suchen können, müssen wir noch einige Bemerkungen über die Reihen

$$(A4.2) \quad R_{0m}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} \bar{I}_0(ny)}{n^m}, \quad R_{1m}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} (\bar{I}_0(ny) - \bar{I}_1(ny))}{n^m} \quad m \geq 1$$

voranstellen. Mittels der Reihenentwicklung

$$(A4.3) \quad \bar{I}_m(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^m \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{k! \Gamma(m+k+1)}$$

für die modifizierten Bessel-Funktionen, in der $\Gamma(x)$ die Gammafunktion bezeichnet, sehen wir, daß die Reihen $R_{01}(0)$ und $R_{11}(0)$ divergieren. Die Reihen $R_{0m}(y)$, $R_{1m}(y)$ mit $m > 1$ konvergieren hingegen für alle Werte von $y \geq 0$, da sich sowohl für $R_{0m}(y)$ als auch für $R_{1m}(y)$ in der Riemannschen ζ -Funktion $\zeta(m)$ eine Majorante finden läßt. Da nun im Grenzfall $I_{\perp} = 0$ auch y verschwindet, müssen wir auf die Divergenzen von $R_{01}(y)$ und $R_{11}(y)$ in geeigneter Weise Rücksicht nehmen. Deshalb führen wir die Umformungen

$$(A4.4a) \quad R_{01}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} (\bar{I}_0(ny) - 1)}{n} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny}}{n} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} (\bar{I}_0(ny) - 1)}{n} - \ln(1 - e^{-y})$$

$$(A4.4b) \quad R_{11}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} (I_0(ny) - I_1(ny) - 1)}{n} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny}}{n} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny} (I_0(ny) - I_1(ny) - 1)}{n} - \ln(1 - e^{-y})$$

durch, die bewirken, daß die verbliebenen Reihen auch für $y=0$ konvergieren und die Divergenz lediglich in der abgespaltenen Funktion auftritt. Da wir $y \ll 1$ voraussetzen, können wir in (A4.4) nach der Formel von EULER-MACLAURIN (siehe z.B. ABRAMOWITZ und STEGUN (1965), 806)

$$(A4.5) \quad \sum_{k=0}^m F(a+kh) = \frac{1}{h} \int_a^b F(t) dt + \frac{1}{2} \{F(b) - F(a)\} + \sum_{k=1}^{m-1} \frac{h^{2k-1}}{(2k)!} B_{2k} \{F^{(2k-1)}(b) - F^{(2k-1)}(a)\} \\ + \frac{h^{2n}}{(2n)!} B_{2n} \sum_{k=0}^{m-1} F^{(2n)}(a+kh + \nu h) \quad 0 < \nu < 1$$

B_{2k} : Bernoullische Zahlen

die Reihen durch Integrale ersetzen. Wendet man diese Formel auf die Reihen (A4.2) für $m > 1$ an, so stellt sich heraus, daß die Differenz zwischen Reihe und Integral auch einen von y unabhängigen Beitrag enthalten kann. Dieses erkennen wir an der Untersuchung der einzelnen Anteile dieser Korrektur, die sich aus den Funktionen

$$(A4.6) \quad F_{0m}(x) = y^m \frac{e^{-x} I_0(x)}{x^m}, \quad F_{1m}(x) = y^m \frac{e^{-x} (I_0(x) - I_1(x))}{x^m} \quad m > 1$$

- unsere Beispiele in der Notation von (A4.5) - herleiten lassen. Der Term $\frac{1}{2} F_{0m}(y)$ etwa wäre noch verhältnismäßig leicht zu berücksichtigen (sein hinsichtlich y konstanter Beitrag ist gleich $1/2$). Aber auch über die Größen $y^k \frac{d^k}{dx^k} F_{0m}(x) \Big|_{x=y}$ können derartige von y unabhängige Beiträge hinzukommen, da $\frac{d^k}{dx^k} F_{0m}(x)$ einen Term proportional $\frac{e^{-x} I_0(x)}{x^{m+k}}$ enthält. Die Schwierigkeiten, den gesamten bezüglich y konstanten Anteil in der Korrektur zu bestimmen, legen es nahe, in der gleichen Weise, wie wir die zu Divergenzen führenden Beiträge in $R_{01}(y)$ und $R_{11}(y)$ abgespalten haben, von den Reihen $R_{0m}(y)$ und $R_{1m}(y)$ für $m > 1$ durch Abtrennen eines geeigneten Anteils zu Reihen überzugehen, die sich beim Ersetzen durch ein Integral von diesem nur durch einen Term unterscheiden, der mindestens von der Ordnung y klein ist.

Die Ausführung dieser Umformungen ergibt im Fall $y \ll 1$ für

die Reihen (A4.2) folgende Näherungen:

$$\begin{aligned}
 R_{01}(y) &= -\ln(1-e^{-y}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny}(\bar{I}_0(ny)-1)}{n} \\
 (A4.7a) \quad &= -\ln(1-e^{-y}) + \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}(\bar{I}_0(x)-1)}{x} + \frac{1}{2}[e^{-y}(\bar{I}_0(y)-1)] + o(y) \\
 &= -\ln(1-e^{-y}) + \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}(\bar{I}_0(x)-1)}{x} + o(y)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{11}(y) &= -\ln(1-e^{-y}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny}(\bar{I}_0(ny)-\bar{I}_1(ny)-1)}{n} \\
 (A4.7b) \quad &= -\ln(1-e^{-y}) + \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}(\bar{I}_0(x)-\bar{I}_1(x)-1)}{x} + o(y)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{0m}(y) &= f(m) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny}\bar{I}_0(ny)-1}{n^m} \\
 (A4.7c) \quad &= f(m) + y^{m-1} \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}\bar{I}_0(x)-1}{x^m} + o(y), \quad m > 1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{1m}(y) &= f(m) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-ny}(\bar{I}_0(ny)-\bar{I}_1(ny))-1}{n^m} \\
 (A4.7d) \quad &= f(m) + y^{m-1} \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}(\bar{I}_0(x)-\bar{I}_1(x))-1}{x^m}, \quad m > 1.
 \end{aligned}$$

Nun divergieren zwar die Integrale in (A4.7c) und (A4.7d) für $y=0$, aber es gilt

$$(A4.8a) \quad \lim_{y \rightarrow 0} y^{m-1} \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}\bar{I}_0(x)-1}{x^m} = 0$$

$$(A4.8b) \quad \lim_{y \rightarrow 0} y^{m-1} \int_y^{\infty} dx \frac{e^{-x}(\bar{I}_0(x)-\bar{I}_1(x))-1}{x^m} = 0$$

wegen der Abschätzungen

$$(A4.9a) \quad 0 \leq y^{m-1} \int_y^a \frac{1 - e^{-x} I_0(x)}{x^m} \leq y^{m-1} \int_y^a \frac{1}{x^{m-1}} = \begin{cases} -y(\ln y - \ln a) & m=2 \\ \frac{y}{m-2} \left(1 - \frac{y^{m-2}}{a^{m-2}}\right) & m>2 \end{cases}$$

und

$$(A4.9b) \quad 0 \leq y^{m-1} \int_y^a \frac{1 - e^{-x} (I_0(x) - I_1(x))}{x^m} \leq 2y^{m-1} \int_y^a \frac{1}{x^{m-1}} = \begin{cases} -2y(\ln y - \ln a) & m=2 \\ \frac{2y}{m-2} \left(1 - \frac{y^{m-2}}{a^{m-2}}\right) & m>2, \end{cases}$$

bei denen wir ausnutzen, daß für $x \geq 0$

$$e^{-x} I_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\psi e^{x(\cos \psi - 1)} \leq \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\psi = 1$$

$$e^{-x} I_0(x) \geq e^{-x} \geq 1 - x$$

(A4.10)

$$e^{-x} (I_0(x) - I_1(x)) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\psi (1 - \cos \psi) e^{x(\cos \psi - 1)} \leq \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\psi (1 - \cos \psi) = 1$$

$$e^{-x} (I_0(x) - I_1(x)) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\psi (1 - \cos \psi) e^{x(\cos \psi - 1)} \geq e^{-2x} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\psi (1 - \cos \psi) = e^{-2x} \geq 1 - 2x$$

gilt.

Nun können wir für $y \ll 1$ in dem Gleichungssystem (A4.1) zur Bestimmung von $\mathfrak{S}$, C_0 und C_1 dadurch Näherungen einführen, daß wir für die dort auftretenden Reihen die Beziehungen (A4.7) einsetzen, wobei wir wegen der Abschätzungen (A4.9) die Integrale in (A4.7c) und (A4.7d) und ferner die Terme $o(y)$ nicht berücksichtigen wollen. In den Integralen der Beziehungen (A4.7a) und (A4.7b) ersetzen wir die unteren Integrationsgrenze durch Null, wobei wir einen Fehler in der so wieso vernachlässigten Größenordnung $o(y)$ machen. Mit den Abkürzungen

$$S_0 = \int_0^\infty dx \frac{e^{-x} (I_0(x) - 1)}{x} = \sum_{k=1}^\infty \frac{(2k-1)!}{2^{2k} (k!)^2}$$

(A4.11)

$$S_1 = \int_0^\infty dx \frac{e^{-x} (I_0(x) - I_1(x) - 1)}{x} = -\frac{1}{4} \sum_{k=0}^\infty \frac{(2k)!}{2^{2k} [(k+1)!]^2}$$

- hier wurden die Reihenentwicklungen (A4.3) für $I_0(x)$ und $I_1(x)$ eingesetzt und gliedweise integriert - erhalten wir

$$(A4.12a) \quad \frac{1}{\sigma} = 1 - \frac{1}{\pi x} \ln(1 - e^{-y}) + \frac{1}{\pi x} S_0 + \frac{1}{4\pi x^2} f(2) + \frac{5}{32\pi x^3} f(3) + o(x^{-4})$$

$$(A4.12b) \quad \frac{1}{C_{||}} = 1 + \frac{1}{2\pi x^2} f(2) + \frac{1}{4\pi x^3} f(3) + o(x^{-4})$$

$$(A4.12c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 - \frac{1}{\pi x} \ln(1 - e^{-y}) + \frac{1}{\pi x} S_1 + \frac{1}{4\pi x^2} f(2) + \frac{5}{32\pi x^3} f(3) + o(x^{-4}).$$

Damit läßt sich also aus (A4.12b) die asymptotische Temperaturabhängigkeit von $C_{||}$ zu

$$(A4.13) \quad C_{||} = 1 - \frac{f(2)}{8\pi I_y^2} \beta^{-2} - \frac{f(3)}{32\pi I_y^3} \beta^{-3} + o(\beta^{-4})$$

gewinnen. Zur Bestimmung von $C_{\perp}$ ist wegen

$$\ln(1 - e^{-y}) \approx \ln y + o(y) \quad \text{für } y \ll 1$$

die mittels (A4.12b) aus (A4.12c) erhaltene Entwicklung

$$(A4.14) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 - \frac{1}{2\pi I_y} \left\{ \beta^{-1} + o(\beta^{-3}) \right\} \ln(2\beta I_y C_{\perp}) + \frac{S_1}{2\pi I_y} \beta^{-1} + \frac{f(2)}{16\pi I_y^2} \beta^{-2} + o(\beta^{-3})$$

zu untersuchen. Berücksichtigen wir nur die Terme bis zur Ordnung β^{-1} , so liefert uns (A4.14) die transzendente Gleichung

$$(A4.15) \quad \frac{1 - C_{\perp}}{C_{\perp}} = \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_y} \left\{ S_1 + \ln \frac{1}{2\beta I_y C_{\perp}} \right\}$$

zur Bestimmung von $C_{\perp}$.

Bei der Aufstellung einer Gleichung für σ beachten wir den Zusammenhang

$$(A4.16) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\sigma} + \frac{S_2 - S_0}{\pi x},$$

der aus (A4.12a) und (A4.12c) folgt. Das Einsetzen dieser Beziehung in (A4.15) liefert uns

$$(A4.17) \quad \frac{1-\zeta}{\zeta} = \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{\parallel}} \left\{ S_0 + \ln \frac{1}{2\beta I_{\perp} \zeta} \right\},$$

wenn lediglich die führenden Terme berücksichtigt werden.

Wie für ζ und $C_{\perp}$ erhalten wir auch für die Nächstnachbar-korrelationsfunktionen analytisch nicht lösbare transzendente Bestimmungsgleichungen. Bezüglich der transversalen Korrelation $\mu_{\perp}$ gilt wegen $C_{\parallel} \approx 1$ und (4.3.12a) der Zusammenhang

$$(A4.18) \quad \zeta \approx 1 - 2\mu_{\perp}$$

mit der spontanen Magnetisierung. Gehen wir damit in (A4.17) ein, so folgt nach einigen Umformungen

$$(A4.19) \quad \mu_{\parallel} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{1}{2\pi I_{\perp}} \beta^{-1} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{2 I_{\perp} (1-2\mu_{\parallel})} \right\}}{1 + \frac{1}{2\pi I_{\parallel}} \beta^{-1} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{2 I_{\perp} (1-2\mu_{\parallel})} \right\}}.$$

Bei der Aufstellung einer Gleichung für $\mu_{\perp}$ gehen wir ähnlich vor. (A4.16) lösen wir nach $\frac{\zeta}{C_{\perp}}$ auf, gehen mit dem Ergebnis in (4.3.12b) ein und setzen das Ergebnis für ζ in (A4.17) ein. Das Resultat lautet

$$(A4.20) \quad \mu_{\perp} = \frac{(S_0 - S_{\parallel}) \beta^{-1}}{4\pi I_{\parallel}} \frac{1}{1 + \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{\perp}} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1} (S_0 - S_{\parallel})}{8\pi I_{\perp} I_{\parallel} \mu_{\perp}} \right\}}.$$

Hinsichtlich der longitudinalen Korrelation $\eta_{\parallel} = \langle S_n^z S_{n+\delta_{\parallel}}^z \rangle$ berücksichtigen wir zunächst (4.2.20), (4.3.9) und (4.3.12) und nähern in

$$(A4.21) \quad \eta_{\parallel} = -\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \zeta \left(C_{\parallel} + \frac{1}{C_{\parallel}} \right)$$

wieder $C_{\parallel}$ durch 1, drücken ζ als Funktion von $\eta_{\parallel}$ aus und setzen das Ergebnis in (A4.17) ein, so daß sich letztlich

$$(A4.22) \quad \eta_{\parallel} = \frac{1}{4} \frac{1 - \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{\parallel}} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{(4\eta_{\parallel}+1)I_{\parallel}} \right\}}{1 + \frac{\beta^{-1}}{2\pi I_{\parallel}} \left\{ S_0 + \ln \frac{\beta^{-1}}{(4\eta_{\parallel}+1)I_{\parallel}} \right\}}$$

ergibt. Für $\eta_{\perp}$ wollen wir lediglich einen Zusammenhang mit der spontanen Magnetisierung herstellen. Die zu (A4.21) analoge Beziehung läßt sich in

$$(A4.23) \quad \eta_{\perp} = -\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(\sigma^2 \frac{C_{\perp}}{\sigma} + \frac{\sigma}{C_{\perp}} \right)$$

umformen. Wiederum ersetzen wir $\frac{\sigma}{C_{\perp}}$ durch (A4.16), so daß wir $\eta_{\perp}$ über

$$(A4.24) \quad \eta_{\perp} = -\frac{1}{4} \left\{ \frac{S_0 - S_{\parallel}}{2\pi I_{\parallel}} \beta^{-1} \sigma - \frac{\sigma^2}{1 + \frac{S_0 - S_{\parallel}}{2\pi I_{\parallel}} \beta^{-1} \sigma} \right\}$$

angeben können, wenn die Gleichung für σ gelöst ist.

2. Schwach gekoppelte Spinketten ($I_{\parallel} \ll I_{\perp}$)

In den Gleichungen

$$(A4.25a) \quad \frac{1}{\sigma} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[e^{-nx} I_0(nx) \right]^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi ny}} \left(1 + \frac{1}{8ny} + \frac{9}{128n^2y^2} + \dots \right)$$

$$(A4.25b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[e^{-nx} I_0(nx) \right] \left[e^{-nx} (I_0(nx) - I_1(nx)) \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi ny}} \left(1 + \frac{1}{8ny} + \frac{9}{128n^2y^2} + \dots \right)$$

$$(A4.25c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[e^{-nx} I_0(nx) \right]^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi ny}} \left(\frac{1}{2ny} + \frac{13}{64n^2y^2} + \dots \right)$$

$$x = 2\beta C_{\parallel} I_{\parallel}, \quad y = 2\beta C_{\perp} I_{\perp}$$

untersuchen wir zunächst die Reihen

$$(A4.26a) \quad T_{0m}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[e^{-nx} I_0(nx)]^2}{n^m}$$

$$(A4.26b) \quad T_{1m}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[e^{-nx} I_0(nx)] [e^{-nx} (I_0(nx) - I_1(nx))]}{n^m}$$

} m halbzahlig
positiv.

$T_{0,1/2}(x)$ und $T_{1,1/2}(x)$ besitzen an der Stelle $x=0$ Singularitäten. Für $m > 1/2$ konvergieren $T_{0m}(x)$ und $T_{1m}(x)$ für alle $x > 0$, eine Majorante ist auch hier in beiden Fällen die Riemannsche ζ -Funktion zum Argument m . Wie im Fall $I_1/I_{11} \ll 1$ wollen wir auch jetzt die Reihen (A4.26) durch Integrale nähern. Durch Abspaltung von Anteilen, die die Singularitäten für $x=0$ enthalten, nehmen wir folgende Umformungen vor:

$$(A4.27a) \quad T_{0,1/2}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2nx} [(I_0(nx))^2 - 1]}{n^{1/2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2nx}}{n^{1/2}}$$

$$(A4.27b) \quad T_{1,1/2}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2nx} (I_0(nx) [I_0(nx) - I_1(nx)] - 1)}{n^{1/2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2nx}}{n^{1/2}}$$

Die Reihe $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2nx}}{n^{1/2}}$ läßt sich durch ein Integral ausdrücken

$$(A4.28) \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-2nx}}{n^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} \frac{1}{e^{u+2x} - 1}$$

(FICHTENHOLZ, Band 2, 798), das sich wiederum wegen

$$(A4.29) \quad \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} \frac{1}{u^{u+2x} - 1} = \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} \left(\frac{1}{e^{u+2x} - 1} - \frac{1}{u+2x} \right) + \frac{\pi}{\sqrt{2x}}$$

in zwei Anteile zerlegen läßt, von denen der erste ein für alle Werte von $x > 0$ konvergentes Integral ist und der zweite die Divergenz für $x=0$ enthält.

Ersetzen wir wieder die jeweils ersten Reihen in (A4.27) gemäß (A4.5) durch Integrale, lassen sich für $T_{0,1/2}(x)$ und $T_{1,1/2}(x)$ für $x \ll 1$ die Entwicklungen

$$(A4.30a) \quad T_{0,1/2}(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-2u} [(I_0(u))^2 - 1] \right\} + \frac{1}{\sqrt{x}} \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} \left(\frac{1}{e^u - 1} - \frac{1}{u} \right) + o(x)$$

$$(A4.30b) \quad T_{1,1/2}(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-2u} (I_0(u) [I_0(u) - I_1(u)] - 1) \right\} + \frac{1}{\sqrt{x}} \int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u}} \left(\frac{1}{e^u - 1} - \frac{1}{u} \right) + o(x)$$

angeben, die zusammen mit

$$(A4.30c) \quad T_{0m}(x) = f(m) + x^{m-1} \int_x^\infty du \frac{[e^{-u} I_0(u)]^2 - 1}{u^m} + o(x)$$

$$(A4.30d) \quad T_{1m}(x) = f(m) + x^{m-1} \int_x^\infty du \frac{e^{-2u} [I_0(u)(I_0(u) - I_1(u)) - 1]}{u^m} + o(x)$$

für $m > 1/2$ in das System (A4.25) einzusetzen sind. Die Beziehungen (A4.30c,d) erhielten wir entsprechend dem Vorgehen im ersten Teil dieses Anhangs durch Abspalten der $\mathcal{J}$ -Funktion von den Reihen (A4.26) für $m > 1/2$ und anschließendem Übergang von der Reihe zum Integral. Berücksichtigen wir in (A4.25) nur die führenden Terme, so können wir die Integrale in (A4.30c,d) mit ihren Faktoren vernachlässigen, da diese Größen im Grenzfall $x \rightarrow 0$ verschwinden. Wir suchen damit nach Lösungen des genäherten Gleichungssystems

$$(A4.31a) \quad \frac{1}{G} = 1 + \frac{\beta^{-1/2}}{\sqrt{\pi I_1}} \frac{1}{C_1} \left\{ A + \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta I_1 C_1}} B \right\}$$

$$(A4.31b) \quad \frac{1}{C_1} = 1 + \frac{\beta^{-1/2}}{\sqrt{\pi I_1}} \frac{1}{C_1} \left\{ A + \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta I_1 C_1}} B' \right\}$$

$$(A4.31c) \quad \frac{1}{C_1} = 1 + \frac{\mathcal{J}(3/2)}{4\pi^{1/2} I_1^{3/2}} \beta^{-3/2} \frac{1}{C_1^{3/2}}$$

mit

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{u}} \left(\frac{1}{e^u - 1} - \frac{1}{u} \right), \quad B = \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-2u} ([I_0(u)]^2 - 1),$$

$$B' = \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{u}} e^{-2u} (I_0(u)[I_0(u) - I_1(u)] - 1).$$

Am einfachsten läßt sich durch Iteration die Entwicklung

$$(A4.32a) \quad C_1 = 1 - \frac{\mathcal{J}(3/2)}{4\pi^{1/2} I_1^{3/2}} \beta^{-3/2} + o(\beta^{-5/2})$$

gewinnen. Setzen wir in (A4.31b) näherungsweise C_1 gleich 1, erhalten wir als Lösung für C_1 den Ausdruck

$$(A4.32b) \quad C_1 = \frac{2}{2 + \frac{2A}{\sqrt{\pi I_1}} \beta^{-1/2} + \frac{B'^2}{2\pi I_1 I_1} \beta^{-2} + \frac{B'}{\sqrt{2\pi I_1 I_1}} \beta^{-1} \sqrt{\frac{B'^2}{2\pi I_1 I_1} \beta^{-2} + 4 + \frac{4A}{\pi I_1} \beta^{-1/2}}}$$

und mit diesem Ergebnis in derselben Näherung aus (A4.31a) für die spontane Magnetisierung

$$(A4.32c) \quad G = \frac{2}{2 + \frac{2A}{\sqrt{\pi I_{\perp}}} \beta^{1/2} + \frac{8B'}{2\pi I_{\perp} I_{\parallel}} \beta^{-2} + \frac{B}{\sqrt{2\pi I_{\perp} I_{\parallel}}} \beta^{-1} \sqrt{\frac{8'^2}{2\pi I_{\perp} I_{\parallel}} \beta^{-2} + 4} + \frac{4A}{\sqrt{\pi I_{\perp}}} \beta^{-1/2}}.$$

Anhang 5: Näherungen unterhalb der Curie-Temperatur

1. Isotropes dreidimensionales Modell und schwache Anisotropie

Wir gehen von den Gleichungen (4.5.30)

$$(A5.1a) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta}{3} \frac{1}{N} \sum_k (C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$(A5.1b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = \frac{1}{2\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\parallel}(k_1, k_2)}{C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta}{6} \frac{1}{N} \sum_k E_{\parallel}(k_1, k_2) (C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$(A5.1c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{\perp}(k_3)}{C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta}{3} \cdot \frac{1}{N} \sum_k E_{\perp}(k_3) (C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$E_{\parallel} = 2 - \cos k_1 - \cos k_2, \quad E_{\perp} = 1 - \cos k_3$$

aus, um das Temperaturverhalten der spontanen Magnetisierung, der Renormalisierungsfaktoren und der Nächstnachbarkorrelationen unterhalb des Curie-Punktes zu bestimmen. Die Gleichungen (A5.1b) und (A5.1c) lassen sich durch Multiplikation mit $2C_{\parallel} I_{\parallel}$ bzw. $C_{\perp} I_{\perp}$ und anschließender Addition zu der einfachen Beziehung

$$(A5.1d) \quad 2I_{\parallel} + I_{\perp} - \beta^{-1} = \beta \left[\frac{5}{3} (C_{\parallel} I_{\parallel})^2 + \frac{4}{3} (C_{\parallel} I_{\parallel})(C_{\perp} I_{\perp}) + \frac{1}{2} (C_{\perp} I_{\perp})^2 \right]$$

zusammenfassen, die wir anstelle von (A5.1b) oder (A5.1c) verwenden können. Für den isotropen Fall $I_{\parallel} = I_{\perp} = I$ können wir die Lösungen von (A5.1) sofort angeben. Aus (A5.1d) erhalten wir als Ergebnis für den Renormalisierungsfaktor

$$(A5.2) \quad C_{\parallel} = C_{\perp} = C = \frac{1}{I} \sqrt{\frac{2}{3} \beta^{-1} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}, \quad \beta_c^{-1} = 2I_{\parallel} + I_{\perp},$$

und wenn wir (A5.2) in (A5.1a) einsetzen, folgt für die spon-

tane Magnetisierung

$$(A5.3) \quad \sigma = \frac{\sqrt{\frac{2}{7}\beta^{-1}(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})}}{W\beta^{-1} + \frac{2}{7}(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})} = \frac{1}{W} \sqrt{\frac{2}{7}\beta(\beta_c^{-1}-\beta^{-1})} + o((\beta_c^{-1}-\beta^{-1}))$$

mit

$$W = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^\pi d^3k \frac{1}{3 - \cos k_1 - \cos k_2 - \cos k_3}.$$

Für das allgemeine anisotrope Modell können wir die Lösungen von (A5.1) nicht mehr analytisch angeben, allerdings noch zeigen, daß σ , $C_{||}$ und $C_{\perp}$ bei Annäherung an die Curie-Temperatur proportional $(\beta_c^{-1} - \beta^{-1})^{1/2}$ verschwinden. Dazu gehen wir mit dem Ansatz

$$(A5.4) \quad C_{||,\perp} = \alpha_{||,\perp}(\beta, I_{||}, I_{\perp}) \sqrt{\beta_c^{-1} - \beta^{-1}}, \quad \sigma = b(\beta, I_{||}, I_{\perp}) \sqrt{\beta_c^{-1} - \beta^{-1}}, \quad \beta_c^{-1} = 2I_{||} + I_{\perp}$$

zunächst in die Gleichung (A5.1d) ein und erhalten

$$(A5.5) \quad \beta^{-1} = \frac{5}{3} \alpha_{||}^2 I_{||}^2 + \frac{4}{3} \alpha_{||} I_{||} \alpha_{\perp} I_{\perp} + \frac{1}{2} \alpha_{\perp}^2 I_{\perp}^2.$$

Wegen $C_{||,\perp} \geq 0$ (4.4.3) können auch $\alpha_{||}$ und $\alpha_{\perp}$ keine negativen Werte annehmen. Für $I_{||} \neq 0$, $I_{\perp} \neq 0$ ist aufgrund von (A5.5) zumindest eine dieser beiden Größen am Curie-Punkt positiv, und mittels der Gleichungen (A5.1b,c) können wir einsehen, daß auch die zweite für β_c^{-1} nicht verschwindet: Mit dem Ansatz (A5.4) erhalten wir nämlich aus (A5.1b) die Relation

$$(A5.6) \quad \frac{1}{\alpha_{||}} = \frac{1}{2\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{E_{||}(k_1, k_2)}{\alpha_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + \alpha_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \beta(\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) \frac{1}{6} \frac{1}{N} \sum_k (\alpha_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + \alpha_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)) E_{||}(k_1, k_2)$$

die für $\beta = \beta_c$, $\alpha_{||} > 0$ und $\alpha_{\perp} = 0$ auf

$$(A5.7) \quad \frac{1}{\alpha_{||}} = \frac{1}{2} (2I_{||} + I_{\perp}) \frac{1}{\alpha_{||} I_{||}}$$

und damit auf einen Widerspruch führt. Entsprechende Überlegungen mittels (A5.1c) führen mit der Annahme $\alpha_{\perp}(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) > 0$ und $\alpha_{||}(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) = 0$ zum Widerspruch. Also muß

$$(A5.8) \quad \alpha_{||,\perp}(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) > 0$$

gelten. Gehen wir schließlich mit dem Ansatz (A5.4) in die

Gleichung (A5.1a) ein, so sehen wir an der Beziehung

$$(A5.9) \quad \frac{1}{b} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{a_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + a_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \beta (\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{N} \sum_k (a_{||} I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + a_{\perp} I_{\perp} E_{\perp}(k_3)),$$

daß für $\beta = \beta_c$ auch die Größe b wegen (A5.8) und $I_{||} \neq 0$, $I_{\perp} \neq 0$ nicht verschwindet. Die Ergebnisse (A5.2) und (A5.3) für $I_{||} = I_{\perp} = I$ sind also Spezialfälle des allgemeinen Temperaturverhaltens

$$(A5.10) \quad \zeta = b(\beta, I_{||}, I_{\perp}) \sqrt{\beta_c^{-1} - \beta^{-1}}, \quad C_{||, \perp} = a_{||, \perp}(\beta, I_{||}, I_{\perp}) \sqrt{\beta_c^{-1} - \beta^{-1}}$$

$$b(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) \neq 0, \quad a_{||, \perp}(\beta_c, I_{||}, I_{\perp}) \neq 0$$

der spontanen Magnetisierung und der Renormalisierungsfaktoren für $I_{||} \neq 0$, $I_{\perp} \neq 0$ unmittelbar unterhalb der Curie-Temperatur.

Da wir keine analytischen Lösungen für die Funktionen $a_{||, \perp}(\beta, I_{||}, I_{\perp})$ und $b(\beta, I_{||}, I_{\perp})$ angeben können, wollen wir die Temperaturabhängigkeit der Nächstnachbarkorrelationen auch nur für das isotrope Modell bestimmen. Mit den Resultaten (A5.2) für C und (A5.3) für ζ erhalten wir gemäß (4.3.12) und (4.4.16)

$$(A5.11) \quad \mu = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{I}{w\beta^{-1} + \frac{2}{7}(\beta_c^{-1} - \beta^{-1})} \right)$$

sowie

$$(A5.12) \quad \eta = -\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \frac{I}{w\beta^{-1} + \frac{2}{7}(\beta_c^{-1} - \beta^{-1})} + \frac{1}{4I} \frac{\frac{2}{7}\beta^{-1}(\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}{w\beta^{-1} + \frac{2}{7}(\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}$$

und da nach (4.4.18)

$$\frac{1}{w} = 3 - 6\mu(\beta_c) = 3 - 6\mu_c$$

und wegen (4.4.16)

$$\eta_c = -\frac{1}{2} \mu_c$$

gilt, schließlich

$$(A5.13a) \quad \mu = \mu_c - \left(\frac{1}{2} - \mu_c \right) \left(1 - \frac{6(1-2\mu_c)}{7} \right) \beta_c (\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) + o((\beta_c^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

und

$$(A5.13b) \quad \eta = \eta_c + \frac{1+4\eta_c}{7} (11 - 24\eta_c) \beta_c (\beta_c^{-1} - \beta^{-1}) + o((\beta_c^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

für die Nächstnachbarkorrelationen μ und η .

Zum Vergleich wollen wir uns noch die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung und der Nächstnachbarkorrelationen in der RPA herleiten. Führen wir die Entwicklung (4.5.29) in dem System (4.3.16) für $H'=0$ durch, können wir aus der ersten der drei Gleichungen

$$(A5.14a) \quad \frac{1}{G^{RPA}} = \frac{1}{\beta G^{RPA}} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta G^{RPA}}{3} \frac{1}{N} \sum_k (I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$(A5.14b) \quad \frac{\mu_{||}^{RPA}}{G^{RPA}} = \frac{1}{4\beta G^{RPA}} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{2 - E_{||}(k_1, k_2)}{I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta G^{RPA}}{12} \frac{1}{N} \sum_k (2 - E_{||}(k_1, k_2)) (I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

$$(A5.14c) \quad \frac{\mu_{\perp}^{RPA}}{G^{RPA}} = \frac{1}{2\beta G^{RPA}} \cdot \frac{1}{N} \sum_k \frac{1 - E_{\perp}(k_3)}{I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3)} + \frac{\beta G^{RPA}}{6} \frac{1}{N} \sum_k (1 - E_{\perp}(k_3)) (I_{||} E_{||}(k_1, k_2) + I_{\perp} E_{\perp}(k_3))$$

sogleich die spontane Magnetisierung zu

$$(A5.15) \quad G^{RPA} = \sqrt{\frac{3\beta_c^{RPA}}{(2I_{||} + I_{\perp})\beta}} \sqrt{(\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}}$$

mit der in (4.4.12) angegebenen Curie-Temperatur $(\beta_c^{RPA})^{-1}$ angegeben. Mit diesem Ergebnis folgt für die transversalen Korrelationen aus (A5.14b,c)

$$(A5.16a) \quad \mu_{||}^{RPA} = \mu_{||,c}^{RPA} \frac{\beta_c^{RPA}}{\beta} - \frac{I_{||}\beta_c^{RPA}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) = \mu_{||,c}^{RPA} - \left(\mu_{||,c}^{RPA} + \frac{I_{||}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} \right) \beta_c^{RPA} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})$$

sowie

$$(A5.16b) \quad \mu_{\perp}^{RPA} = \mu_{\perp,c}^{RPA} \frac{\beta_c^{RPA}}{\beta} - \frac{I_{\perp}\beta_c^{RPA}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) = \mu_{\perp,c}^{RPA} - \left(\mu_{\perp,c}^{RPA} + \frac{I_{\perp}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} \right) \beta_c^{RPA} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})$$

und über

$$(A5.17) \quad \eta_{||\perp}^{RPA} = \frac{(G^{RPA})^2}{4} + \frac{G^{RPA}}{2} \mu_{||\perp}^{RPA} - \frac{\mu_{||\perp}^{RPA}}{2}$$

nach RISTIG (1964) für die longitudinalen Korrelationen

$$(A5.18a) \quad \eta_{||}^{RPA} = \eta_{||,c}^{RPA} - \eta_{||,c}^{RPA} \frac{\beta_c^{RPA}}{\beta} \sqrt{\frac{3\beta_c^{RPA}}{(2I_{||} + I_{\perp})\beta}} \sqrt{(\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}} + \left(\frac{3}{\beta} + \frac{I_{||}}{2} \right) \frac{\beta_c^{RPA}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) + o(((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

sowie

$$(A5.18b) \quad \eta_{\perp}^{RPA} = \eta_{\perp,c}^{RPA} - \eta_{\perp,c}^{RPA} \frac{\beta_c^{RPA}}{\beta} \sqrt{\frac{3\beta_c^{RPA}}{(2I_{||} + I_{\perp})\beta}} \sqrt{(\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}} + \left(\frac{3}{\beta} + \frac{I_{\perp}}{2} \right) \frac{\beta_c^{RPA}}{4(2I_{||} + I_{\perp})} ((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1}) + o(((\beta_c^{RPA})^{-1} - \beta^{-1})^2)$$

2. Schwach gekoppelte Netzebenen ($I_{\perp} \ll I_{\parallel}$)

Für die Untersuchung des quasi-zweidimensionalen Modells führen wir nach dem Übergang zum unendlich großen Gitter in den Gleichungen (A5.1) die Integration über die Variablen k_1 und k_2 mit dem Ergebnis

$$(A5.19a) \quad \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk_3 \frac{1}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)} K\left(\frac{2C_{\parallel}I_{\parallel}}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)}\right) + \frac{\beta}{3}(2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp})$$

$$(A5.19b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = \frac{1}{2\beta} \frac{1}{C_{\parallel}I_{\parallel}} - \frac{1}{2\beta} \frac{C_{\perp}I_{\perp}}{C_{\parallel}I_{\parallel}} \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk_3 \frac{E_1(k_3)}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)} K\left(\frac{2C_{\parallel}I_{\parallel}}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)}\right) + \frac{5}{6}\beta C_{\parallel}I_{\parallel} + \frac{\beta}{3} C_{\perp}I_{\perp}$$

$$(A5.19c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk_3 \frac{E_1(k_3)}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)} K\left(\frac{2C_{\parallel}I_{\parallel}}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)}\right) + \frac{2}{3}\beta C_{\parallel}I_{\parallel} + \frac{\beta}{2} C_{\perp}I_{\perp}$$

durch, wobei $K(k)$ das vollständige elliptische Integral 1. Art zum Modul k bedeutet. Unter der Voraussetzung $I_{\perp} \ll I_{\parallel}$ weicht dieser Modul in den Gleichungen (A5.19) nicht sehr stark von 1 ab, so daß wir die Entwicklung

$$(A5.20) \quad K(k) = \ln \frac{4}{k'} + \left(\frac{1}{2}\right)^2 \left(\ln \frac{4}{k'} - \frac{2}{1.2}\right) k'^2 + o(k'^4) \text{ für } k \lesssim 1 \text{ mit } k'^2 = 1 - k^2$$

ausnutzen können, um $K(k)$ näherungsweise durch $\ln \frac{4}{k'}$ zu ersetzen. Wegen

$$(A5.21a) \quad \ln \frac{4}{k'} = \ln 4 - \frac{1}{2} \ln k'^2 = \ln 4 - \frac{1}{2} \ln E_1(k_3) + \frac{1}{2} \ln \frac{C_{\parallel}I_{\parallel}}{C_{\perp}I_{\perp}} - \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)}{4C_{\parallel}I_{\parallel}}\right) + \ln \left(1 + \frac{C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)}{2C_{\parallel}I_{\parallel}}\right)$$

können wir mit

$$\ln(1+x) \approx x \quad \text{für } x \ll 1$$

weiter zu

$$(A5.21b) \quad \ln \frac{4}{k'} = \frac{1}{2} \ln \frac{16C_{\parallel}I_{\parallel}}{C_{\perp}I_{\perp}} - \frac{1}{2} \ln E_1(k_3) + \frac{3}{8} \frac{C_{\perp}I_{\perp}}{C_{\parallel}I_{\parallel}} E_1(k_3)$$

nähern. Setzen wir diese Approximation für das vollständige elliptische Integral in (A5.19) ein, so erhalten wir

$$(A5.22a) \quad \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk_3 \frac{1}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_1(k_3)} \left\{ \ln \frac{16C_{\parallel}I_{\parallel}}{C_{\perp}I_{\perp}} - \ln E_1(k_3) + \frac{3}{4} \frac{C_{\perp}I_{\perp}}{C_{\parallel}I_{\parallel}} E_1(k_3) \right\} + \frac{\beta}{3} (2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp})$$

$$(A5.22b) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk_3 \frac{E_{\perp}(k_3)}{2C_{\parallel}I_{\parallel} + C_{\perp}I_{\perp}E_{\perp}(k_3)} \left\{ \ln \frac{16C_{\parallel}I_{\parallel}}{C_{\perp}I_{\perp}} - \ln E_{\perp}(k_3) + \frac{3}{4} \frac{C_{\perp}I_{\perp}}{C_{\parallel}I_{\parallel}} E_{\perp}(k_3) \right\} + \beta \left(\frac{2}{3} C_{\parallel}I_{\parallel} + \frac{1}{2} C_{\perp}I_{\perp} \right)$$

$$(A5.22c) \quad 2I_{\parallel} + I_{\perp} - \beta^{-1} = \beta \left[\frac{5}{3} (C_{\parallel}I_{\parallel})^2 + \frac{4}{3} (C_{\parallel}I_{\parallel})(C_{\perp}I_{\perp}) + \frac{1}{2} (C_{\perp}I_{\perp})^2 \right].$$

Dabei haben wir statt (A5.19b) die durch Zusammenfassung von (A5.19b) und (A5.19c) gewonnenen Beziehung (A5.22c) in das Gleichungssystem übernommen. Berücksichtigen wir nach Ausführung der Integration lediglich die führenden Beiträge, können wir aus

$$(A5.23a) \quad \frac{C_{\parallel}I_{\parallel}}{\beta} = \frac{1}{\beta} \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{1}{4} \ln \frac{16C_{\parallel}I_{\parallel}}{C_{\perp}I_{\perp}} - A \right\} + \frac{2}{3} \beta (C_{\parallel}I_{\parallel})^2$$

$$(A5.23b) \quad \frac{C_{\perp}I_{\perp}}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{1}{4} \ln \frac{16C_{\parallel}I_{\parallel}}{C_{\perp}I_{\perp}} - B \right\} + \frac{2}{3} \beta (C_{\parallel}I_{\parallel})^2$$

$$(A5.23c) \quad 2I_{\parallel} + I_{\perp} = \beta^{-1} + \frac{5}{3} \beta (C_{\parallel}I_{\parallel})^2$$

mit

$$A = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi} dx \ln(1 - \cos x) = -\frac{1}{4} \ln 2, \quad B = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi} dx (1 - \cos x) \ln(1 - \cos x)$$

für den Renormalisierungsfaktor $C_{\parallel}$ das Temperaturverhalten

$$(A5.24a) \quad C_{\parallel} = \frac{1}{I_{\parallel}} \sqrt{\frac{3}{5\beta} (\beta^{-1} - \beta^{-1})}$$

und als transzendente Bestimmungsgleichung für die spontane Magnetisierung und den zweiten Renormalisierungsfaktor

$$(A5.24b) \quad \frac{1}{\beta} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta^{-1} - \beta^{-1})}} \left\{ \ln \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} + \ln \left[\frac{16\sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta^{-1} - \beta^{-1})}}{5I_{\parallel}} + \frac{32(B-A)}{\pi\beta I_{\parallel}} \right] - 4A \right\} + 2\sqrt{\frac{\beta}{15}(\beta^{-1} - \beta^{-1})}$$

$$(A5.24c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta^{-1} - \beta^{-1})}} \left\{ \ln \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} + \ln \frac{16\sqrt{\frac{3}{5}\beta(\beta^{-1} - \beta^{-1})}}{C_{\perp}I_{\parallel}} - 4B \right\} + 2\sqrt{\frac{\beta}{15}(\beta^{-1} - \beta^{-1})}$$

herleiten, wobei wir zur Bestimmung der letzten Relation ausnutzen, daß näherungsweise

$$(A5.25) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{G} - \frac{2}{\beta\pi} (B-A) \frac{1}{C_{\parallel} I_{\parallel}}$$

gilt.

3. Schwach gekoppelte Spinketten ($I_{\parallel} \ll I_{\perp}$)

In diesem Spezialfall formen wir die Gleichungen (4.5.30) mittels der zwei- und eindimensionalen Zustandsdichten

$$(A5.26a) \quad g_2(E_2) = \int_{-\pi}^{+\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{+\pi} dk_2 \delta(E_2 - 2 + \omega k_1 + \omega k_2) = \begin{cases} 4K\left(\sqrt{\frac{E_2(4-E_2)}{4}}\right) & \text{für } 0 \leq E_2 \leq 4 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$K(k)$: vollst. ell. Int. 1. Art

und

$$(A5.26b) \quad g_1(E_1) = \int_{-\pi}^{+\pi} dk \delta(E_1 - 1 + \omega k) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{1 - (E_1 - 1)^2}} & \text{für } 0 \leq E_1 \leq 2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

über

$$(A5.27a) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{+\pi} d^3k \int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 \delta(E_1 - E_2(k_3)) \delta(E_2 - E_{\parallel}(k_1, k_2)) \frac{1}{C_{\parallel} I_{\parallel} E_2 + C_{\perp} I_{\perp} E_1} + \frac{\beta}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{+\pi} d^3k (C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_1(k_3))$$

$$(A5.27b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{+\pi} d^3k \int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 \delta(E_1 - E_2(k_3)) \delta(E_2 - E_{\parallel}(k_1, k_2)) \frac{E_2}{C_{\parallel} I_{\parallel} E_2 + C_{\perp} I_{\perp} E_1} + \frac{\beta}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{+\pi} d^3k E_{\parallel}(k_1, k_2) (C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_1(k_3))$$

$$(A5.27c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{+\pi} d^3k \int_{-\infty}^{+\infty} dE_1 dE_2 \delta(E_1 - E_2(k_3)) \delta(E_2 - E_{\parallel}(k_1, k_2)) \frac{E_1}{C_{\parallel} I_{\parallel} E_2 + C_{\perp} I_{\perp} E_1} + \frac{\beta}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{+\pi} d^3k E_1(k_3) (C_{\parallel} I_{\parallel} E_{\parallel}(k_1, k_2) + C_{\perp} I_{\perp} E_1(k_3))$$

in

$$(A5.28a) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{\beta} \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} du dv \frac{K'(u)}{\sqrt{1-v^2}} \cdot \frac{1}{2C_{\parallel} I_{\parallel} (1+u) + C_{\perp} I_{\perp} (1+v)} + \frac{\beta}{3} (2C_{\parallel} I_{\parallel} + C_{\perp} I_{\perp})$$

$$(A5.28b) \quad \frac{1}{C_{\parallel}} = \frac{1}{\beta} \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} du dv \frac{K'(u)}{\sqrt{1-v^2}} \cdot \frac{1+u}{2C_{\parallel} I_{\parallel} (1+u) + C_{\perp} I_{\perp} (1+v)} + \frac{\beta}{6} (5C_{\parallel} I_{\parallel} + 2C_{\perp} I_{\perp})$$

$$(A5.28c) \quad \frac{1}{C_{\perp}} = \frac{1}{\beta} \frac{2}{\pi^3} \int_{-1}^{+1} du dv \frac{K'(u)}{\sqrt{1-v^2}} \cdot \frac{1+v}{2C_{\parallel} I_{\parallel} (1+u) + C_{\perp} I_{\perp} (1+v)} + \frac{\beta}{6} (4C_{\parallel} I_{\parallel} + 3C_{\perp} I_{\perp})$$

um, wobei die Variablentransformationen

$$u = \frac{E_2 - 2}{2}, \quad v = E_1 - 1$$

durchgeführt wurden und $K'(u) \equiv K(u') = K(\sqrt{1-u^2})$ bedeutet. Die Integrationen über v lassen sich analytisch durchführen, so daß man schließlich

$$(A5.29a) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{1}{\sqrt{2C_u I_u (1+u)} \sqrt{2C_u I_u (1+u) + 2C_1 I_1}} + \frac{\beta}{3} (2C_u I_u + C_1 I_1)$$

$$(A5.29b) \quad \frac{1}{C_u} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{\sqrt{1+u}}{\sqrt{2C_u I_u} \sqrt{2C_u I_u (1+u) + 2C_1 I_1}} + \frac{\beta}{6} (5C_u I_u + 2C_1 I_1)$$

$$(A5.29c) \quad \frac{1}{C_1} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{C_1 I_1} - \frac{1}{\beta} \cdot \frac{C_u I_u}{C_1 I_1} \cdot \frac{4}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{\sqrt{1+u}}{\sqrt{2C_u I_u} \sqrt{2C_u I_u (1+u) + 2C_1 I_1}} + \frac{\beta}{6} (4C_u I_u + 3C_1 I_1)$$

erhält. Statt der letzten Gleichung (A5.29c) wird wieder (A5.22c) benutzt, die sich auch aus (A5.29b) und (A5.29c) gewinnen läßt. Unter Verwendung der Abkürzungen

$$I_1(x) = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{1}{\sqrt{1+u} \sqrt{1+u+x}}$$

$$I_2(x) = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{\sqrt{1+u}}{\sqrt{1+u+x}}, \quad x = \frac{C_u I_u}{C_1 I_1}$$

suchen wir also die Lösungen x, G, C_u des Systems

$$(A5.30a) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{C_u I_u} I_1(x) + \frac{\beta}{3} C_u I_u (2+x)$$

$$(A5.30b) \quad 1 = \frac{1}{\beta I_u} I_2(x) + \frac{\beta}{6} C_u I_u (5+2x)$$

$$(A5.30c) \quad \beta_c^{-1} - \beta^{-1} = \beta (C_u I_u)^2 \left[\frac{5}{3} + \frac{4}{3}x + \frac{1}{2}x^2 \right]$$

für $x \gg 1$. Da wir lediglich daran interessiert sind, welche Abhängigkeit von der Wechselwirkung I_u bei der Entkopplung der Spinketten maßgebend ist, können wir die Integrale $I_1(x)$ und $I_2(x)$ durch

$$I_1(x) \approx \frac{1}{\sqrt{x}} \tilde{I}_1, \quad \tilde{I}_1 = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \frac{1}{\sqrt{1+u}}$$

$$I_2(x) \approx \frac{1}{\sqrt{x}} \tilde{I}_2, \quad \tilde{I}_2 = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^{+1} du K'(u) \sqrt{1+u}$$

nähern. Berücksichtigen wir in dem System (A5.30) nur die führenden Terme, so finden wir mit den Lösungen von

$$(A5.31a) \quad \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{C_u I_u} \frac{1}{\sqrt{x}} \tilde{I}_1$$

$$(A5.31b) \quad 1 = \frac{1}{\beta I_1} \frac{1}{\sqrt{x}} \tilde{I}_2$$

$$(A5.31c) \quad \beta_c^{-1} - \beta^{-1} = \beta (C_u I_u)^2 \frac{x^2}{2}$$

für die Renormalisierungsfaktoren und die spontane Magnetisierung die Abhängigkeiten

$$(A5.32a) \quad C_1 = \frac{1}{I_1} \sqrt{\frac{2}{\beta} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}$$

$$(A5.32b) \quad C_u = \frac{I_u \beta^2}{\tilde{I}_2} \sqrt{\frac{2}{\beta} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}$$

$$(A5.32c) \quad \sigma = \frac{I_u \beta^2}{\tilde{I}_1 \tilde{I}_2} \sqrt{\frac{2}{\beta} (\beta_c^{-1} - \beta^{-1})}$$

von der Temperatur und den Wechselwirkungskonstanten I_u und I_1 .

Literaturhinweise

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.A. Handbook of Mathematical Functions, Dover Publ., New York 1965
- BETHE, H.A. Z. Physik 71 (1931), 205
- BLOCH, F. Z. Physik 61 (1930), 206
- BOGOLIUBOV, N.N.; TYABLIKOV, S.V. Sov. Phys. Doklady 4, (1959), 604
- BOGOLIUBOV, N.N. Phys. Abh. Sowjetunion 6, (1962), 1, 113, 229
- CALLEN, H.B. Phys. Rev. 130 (1963), 890
- DE JONGH, L.J.; MIEDEMA, A.R. Adv. Phys. 23 (1974), 1
- DIRAC, P.A.M. Proc. Roy. Soc. A123 (1929), 714
- DIRAC, P.A.M. The Principles of Quantum Mechanics, Clarendon Press, Oxford 1968, 61
- FICHTENHOLZ, G.M. Differential- und Integralrechnung, Band 2, VEB Verlag der Wissenschaften, Berlin 1964
- HANUS, J. Phys. Rev. Lett. 11 (1963), 336
- HEISENBERG, W. Z. Physik 49 (1928), 619
- HULTHÉN, L. Arkiv. Mat. Astron. Fys. 26A (1938), No. 11
- ISING, E. Z. Physik 31, (1925), 253
- KEFFER, F.; LOUDON, R. J. Appl. Phys. 32 (1961), S2; 33 (1962), 250
- KENAN, R.P. Phys. Rev. B7 (1970), 3205
- LINES, M.E. Phys. Rev. 133A (1964), 841
- MERMIN, N.D.; WAGNER, H. Phys. Rev. Lett. 17 (1966), 1133
- MIKESKA, H.J. Z. Physik 261 (1973), 437
- MUBAYI, V.; LANGE, R.V. Phys. Rev. 178 (1969), 882
- ONSAGER, L. Phys. Rev. 65 (1944) 117
- RISTIG, M. Diplomarbeit Universität München 1964
- ROTH, L.M. Phys. Rev. Lett. 20 (1968), 1431

- SMART, J.S. Effective Field Theories of Magnetism, W.B.
Saunders Company, Philadelphia und London 1966
- STANLEY, H.E.; KAPLAN, T.A. Phys. Rev. Lett. 17 (1966), 913
- TAHIR-KHELI, R.A.; TER HAAR, D. Phys. Rev. 127 (1962), 95
- TYABLIKOV, S.V. Methods in the Quantum Theory of Magnetism,
Plenum Press New York 1967
- WATSON, G.N. Quart. J. Math. 10 (1939), 266
- WEISS, P. J. Phys. Rad. 4 (1907), 661
- WORTIS, M. Phys. Rev. 132 (1963), 85
- ZUBAREV, D.N. Fort. Phys. 9 (1961), 275

Herrn Prof. Dr. R. J. Jelitto danke ich recht herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit und für die Unterstützung bei ihrer Ausführung.

Ferner gilt mein Dank dem Hochschulrechenzentrum der Universität Frankfurt, auf dessen Rechenanlage U1108 die numerischen Berechnungen durchgeführt wurden.

Meine akademischen Lehrer waren:

Arp, Bagge, Grewe, Hinkelmann, Jelitto, Juza, Karstensen, Koppe, Kroebel, Lincke, Lochte-Holtgreven, Pejas, Richter, Trümper, Weise.

Lebenslauf

Geburt: 19.9.1943 in Tönning/Kreis Nordfriesland

Eltern: Oberamtsrat Wilhelm Treplin
Emmy Treplin, geb. Karstens

Schulausbildung: 1950-1952 Volksschule in Tönning
1952-1954 Wilhelminenschule Preetz
1954-1963 Kieler Gelehrtenschule, Kiel,
mit der Ablegung der Reifeprüfung als
Abschluß.

Wehrdienst: 1963-1965 mit der Entlassung als Leut-
nant d.R.

Hochschulausbildung: 1965-1971 Studium der Physik an der
Christian-Albrechts-Universität Kiel
mit dem Abschluß als Diplom-Physiker.
Thema der Diplom-Arbeit: Die Zustands-
dichte von Ein-Teilchen-Anregungen in
der hexagonal-dichtesten Kugelpackung
und ihre Übereinstimmung mit der ent-
sprechenden Zustandsdichte für das
kubisch-flächenzentrierte Gitter.
1972 Stipendium nach dem Graduierten-
förderungsgesetz.

Beruf: Ab 1973 wissenschaftlicher Angestellter
am Institut für Theoretische Physik der
Universität Frankfurt, Lehrstuhl Prof.
Dr. R. J. Jelitto, unter dessen Anlei-
tung ich die vorgelegte Dissertation
anfertigte.

Familienstand: ledig

